

G 表面与低维物理

分会召集人：郭建东、王兵、江颖、何丕模、贾金锋、陈曦

G1-01

专题代号： G

量子材料表面电子-晶格相互作用的动力学研究

郭建东

中国科学院物理研究所

凝聚态材料丰富的物理性质与其中的电子-晶格相互作用密切相关。从晶格动力学的角度，这种相互作用被描述为电子-声子耦合，其在能量/动量空间的详细特征由电子-声子耦合矩阵元给出。耦合矩阵元的实验测量需要电子结构与声子色散的精确数据，但是目前对声子色散特别是表面声子的测量还受到实验手段的局限。我们研制了一种高分辨率电子能量损失谱仪，能够对表面声子、等离激元等元激发进行能量/动量二维成像的探测，其动量分辨率、动量测量范围与效率都远优于现有商业化谱仪。本报告将介绍我们最近利用该谱仪开展的几项工作，包括对 FeSe/SrTiO₃ 超导增强界面非绝热电子-晶格相互作用的解析，以及三维拓扑绝缘体 Bi₂Se₃ 表面态等离激元反常长寿命的观测等。

关键词： 电子-声子耦合； 高分辨率电子能量损失谱； 表面等离激元

G1-02

专题代号： G

Controlled Growth and Versatile Applications of Metallic Transitional Metal Dichalcogenides

Yanfeng Zhang *

^a Center for Nanochemistry, Peking University, Beijing, China.

^bDepartment of Materials Science and Engineering, College of Engineering, Peking University, Beijing, China.
Yanfengzhang@pku.edu.cn

Metallic transition metal dichalcogenides (MTMDCs) have manifested many intriguing properties in their bulk states, such as magnetism, charge density wave, and superconductivity. Very recently, nano-thick MTMDCs have been reported to be essential building blocks for constructing next-generation electronic and energy-storage applications, and more significantly for exploring unique physical issues associated with the dimensionality effect. However, the batch production of such envisioned few-layer MTMDCs remains challenging based on the existing physical or chemical exfoliation methods. Our group reported the direct synthesis of high-quality semiconducting and metallic TMDCs materials on both conducting Au foils and insulating substrates towards different applications^[1,2]. Particularly, we designed a facile chemical vapor deposition route (CVD) for the direct production of 1T-VS₂ nanosheets on SiO₂/Si substrates, which represented spontaneous superlattice periodicities and excellent electrical conductivities ($\sim 3 \times 10^3 \text{ S cm}^{-1}$), enabling a variety of applications as contact electrodes.^[3] Subsequently, we also developed a van der Waals epitaxial strategy for the direct synthesis of metallic 1T-VSe₂ monocrystalline nanosheets on mica via a similar CVD method.^[4] Very recently, we have also obtained thickness-tunable 2H-TaS₂ flakes and centimeter-size ultrathin films on an electrode material of Au foils. Extrahigh hydrogen evolution reaction (HER) efficiency was demonstrated on the CVD-grown 2H-TaS₂/Au foils, with the efficiency even comparable to the traditional catalyst of Pt.^[5] All these work should provide brand new insights into the direct syntheses and property investigations of nano-thick metallic 2D TMDCs crystals.

References

- [1] Yanfeng Zhang*, et al., **Chem. Soc. Rev.** 44(2015), pp. 2587; **Adv. Mater.** 28(2016), pp. 6207; **Nature Commun.** 9(2018), pp. 979.
- [2] Yanfeng Zhang*, et al., **Adv. Energy. Mater.** 6(2016), pp.1600459; **Adv. Mater.** 28(2016), pp. 10664.
- [3] Yanfeng Zhang*, et al., **Nano Lett.** 17(2017), pp. 4908.

[4] Yanfeng Zhang*, et al., **Adv. Mater.** 2017, pp. 1702359.

[5] Yanfeng Zhang*, et al., **Nature Commun.** 8(2017), pp. 958; **Adv. Mater.** 2018, pp. 1705916.

G1-03

专题代号: G

晶圆级（100 平方厘米）单晶六方氮化硼的制备

王理、白雪冬、刘开辉

中国科学院物理研究所, 北京 100190

Email: liwang@iphy.ac.cn

随着传统硅基电子器件的发展进入瓶颈期, 基于量子材料的新器件研究已成为当今科技领域的前沿热点。作为量子材料家族的重要分支, 二维量子材料仅有原子级厚度, 量子效应显著, 在变革性技术研发和先进装备制造领域极具潜力。总所周知, 器件的集成度能直接决定其性能, 高集成度器件(例如芯片)的制造是基于高精度微纳加工和晶圆级单晶宏量制备的。对于二维量子材料, 其器件制造工艺与传统半导体(硅、砷化镓、氮化镓等)器件微加工工艺兼容。因此, 在现阶段, 大面积、高质量的二维单晶制备是实现二维量子器件规模化应用的核心关键。

现有研究表明, 外延生长是兼顾尺寸和质量的二维单晶生长方法, 其主要挑战就是衬底表面对称性的调控。常见的二维单晶生长衬底是单晶金属箔, 其表面具有中心反演对称性, 适合于外延晶格也具有中心反演对称性的材料, 例如石墨烯(二维导体)。但是对于绝大多数其它的二维材料, 比如六方氮化硼(二维绝缘体), 其晶格是非中心反演对称的, 因而无法在常规金属单晶上外延生长出单晶材料。针对这一难题, 课题组与合作者设计出了一种具有特殊台阶方向的非中心反演对称性的单晶晶面 $\text{Cu}(110)/\langle 211 \rangle$, 利用六方氮化硼晶畴中硼型和氮型锯齿形边界与 $\langle 211 \rangle$ 台阶边缘耦合强度的能量差打破晶畴在衬底表面取向的对称性, 从而实现对六方氮化硼晶畴单一取向的控制生长, 并无缝拼接为分米级单晶薄膜。同时, 结合原位生长技术与第一性原理计算, 课题组对生长过程进行了深入动力学研究, 提出了全新的生长机理。

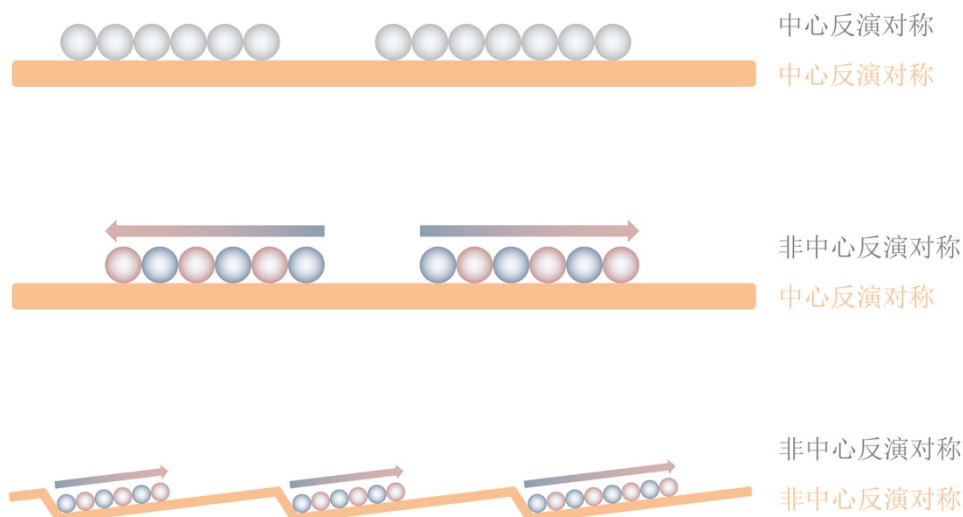


图 1. 利用对称性破缺衬底外延二维六方氮化硼单晶的设计思路

关键词：二维材料；单晶生长；原位技术；生长动力学

参考文献

【1】Li Wang et al., Epitaxial growth of a 100-square-centimetre single-crystal hexagonal boron nitride monolayer on copper, Nature, 2019, 570, 91

G1-04

专题代号： G

界面诱导的 LaCoO₃ 结构相变

孟梦、郭建东

中国科学院物理研究所，北京 100190

Email: mengm@iphy.ac.cn

摘要：实现氧空位有序结构，是调控复杂氧化物多功能特性的一种行之有效的手段。由于氧空位通道能够引起更高的离子导电特性，因此获得氧空位有序结构在能源及环境领域有着巨大的应用价值。有些材料的热力学稳定相就是氧空位有序结构，如烧绿石结构的 SrCoO_{2.5}，通过极端的制备条件以及离子液体调控可以实现结构相变。钙钛矿 LaCoO₃ 是唯一的热力学稳定相。通过热力学过程主导的薄膜生长方法，即使在超高真空环境下，也无法获得氧空位

有序的亚稳相。对于有着优异的电化学特性且已经被广泛应用于固态氧化物燃料电池阴极 LaCoO_3 来说，获得稳定的氧空位有序结构 LaCoO_x 有着重要的意义。

截然不同的氧化物形成的异质结，界面处存在的费米能级高度差将会驱动自发的电荷流。带电氧空位的定向流动，不仅可以消除费米能级高度差，还可以大尺度地影响氧化物的晶格自由度，即引起结构相变。本工作利用脉冲激光沉积技术，生长了高质量的 $\text{LaCoO}_3/\text{LaTiO}_3$ 异质结，并利用 XRD 和高分辨 STEM 技术研究了 LaCoO_x 的结构随 LaTiO_3 厚度的演变过程（如图 1）。结果表明，随着 LaTiO_3 厚度的增加， LaCoO_x 能够从钙钛矿结构的 LaCoO_3 相相继转变为中间相 $\text{La}_3\text{Co}_3\text{O}_8$ 相和烧绿石结构的 $\text{La}_2\text{Co}_2\text{O}_5$ 。继续增加 LaTiO_3 的厚度， LaCoO_x 将无法保持稳定的单相结构，转变为无序相。利用 STEM-电子能量损失谱 EELS 研究了界面引起的电子态的改变，表明 LaCoO_x 中的价态改变为大范围且均匀分布的。伴随着结构相变，我们还研究了宏观磁性的巨大改变。本工作表明了氧化物界面电荷-晶格间强烈的相互作用对界面新奇效应以及氧化物结构稳定性的影响。

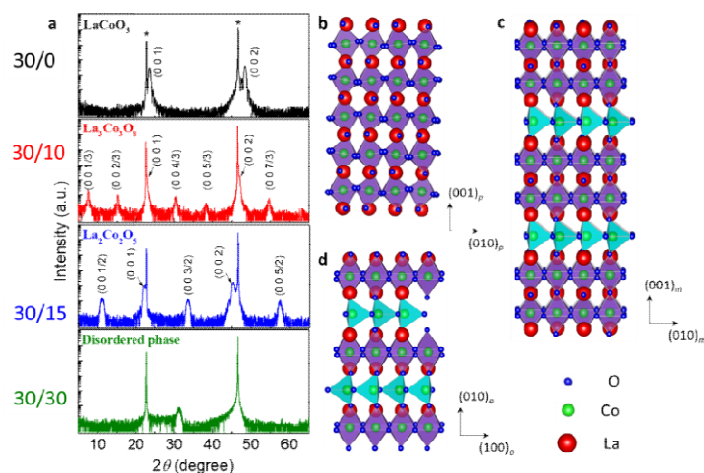


图 1. $\text{LaCoO}_3/\text{LaTiO}_3$ 异质结随 LaTiO_3 厚度发生的结构相变。

关键词： LaCoO_3 ，氧化物异质结，结构相变，STEM-EELS。

基金项目：国家自然科学基金项目（NO.11634016）

G1-05

专题代号： G

$\text{CaHfO}_3/\text{SrTiO}_3$ 界面存在的一种新型电子气

张蒙, 谢燕武*

浙江大学物理学系, 浙江杭州, 310008

*Email: ywxie@zju.edu.cn

关键词: SrTiO₃, 界面, 电子气, 复杂氧化物

摘要: SrTiO₃(STO) is the workhorse oxide semiconductor. The single-crystal STO (001) has two different surface terminations, TiO₂ and SrO. One most remarkable observation in previous studies is that only the heterointerfaces with TiO₂-terminated STO, which usually combines with polar oxides such as LaAlO₃, host an electron gas (EG). In this work, we report that an extremely robust EG can be generated between a non-polar oxide, CaHfO₃, and STO (001) with either termination. Unlike the well-known EG of LaAlO₃/STO, this new EG essentially has no critical thickness of CaHfO₃, can survive a long-time annealing in oxygen at high temperature, and its transport properties are stable under exposure to water and other polar solvents. In addition, the excellent dielectric properties of CaHfO₃ enable us to control this EG by electrostatic gating, and field-effect devices with good performance are demonstrated. These results show that this new EG is unique and promising for applications in oxide electronics.

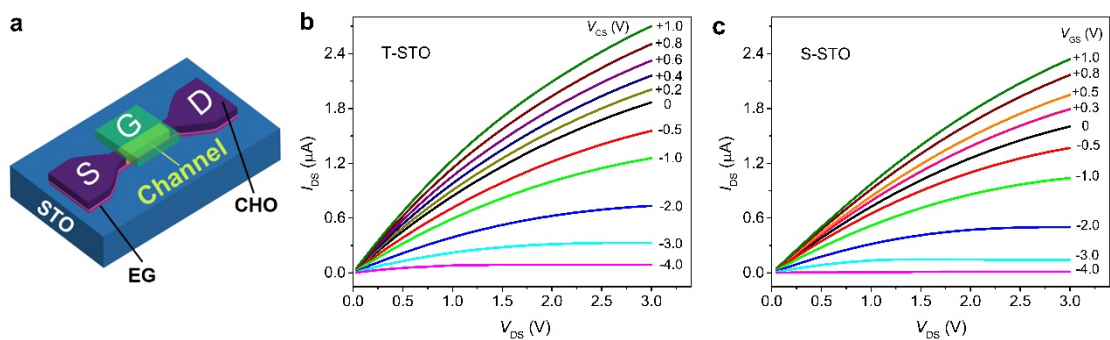


Fig. 1 Field effect transistor with CaHfO₃/STO heterointerfaces with different terminations of STO.

G1-06

专题代号: G

Large gap quantum spin Hall state in two-dimensional transition metal dichalcogenides

陈鹏

上海交通大学，物理与天文学院，上海，200240

Email: pchen229@sjtu.edu.cn

Abstract: Quantum spin Hall (QSH) insulators are two-dimensional (2D) systems with 1D spin conduction channels at the edges. They are ideally suited for advanced spintronic applications, but such systems are few. All experimentally verified systems thus far possess small band gaps unsuitable for applications at ambient temperature. Finding a material that is easy to make and also possesses a large gap is a topic of great interest and importance. We report the successful growth of a quasi-freestanding WSe₂ single layer with the 1T' structure that does not exist in the bulk form of WSe₂. Using angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES) and scanning tunneling microscopy/spectroscopy (STM/STS), we observe a gap of 129 meV in the 1T' layer and an in-gap edge state located near the layer boundary. The system's 2D TI characters are confirmed by first-principles calculations. The observed gap diminishes with doping by Rb adsorption, ultimately leading to an insulator–semimetal transition. The discovery of this large-gap 2D TI with a tunable band gap opens up opportunities for developing advanced nanoscale systems and quantum devices [1].

Key words: Quantum spin Hall effect, transition metal dichalcogenides, 1T'WSe₂, angle-resolved photoemission spectroscopy, molecular beam epitaxy

Reference:

[1] P. Chen et al., Large quantum-spin-Hall gap in single-layer 1T' WSe₂, Nat. Comm. 2018, 9 (2013).

G1-08

专题代号： G

纳米界面光胜载流子动力学

龙闰

北京师范大学化学学院, 100875, runlong@bnu.edu.cn

摘要: 界面电子转移是决定太阳能电池光电转换效率的主要因素。通常认为电子施主-受主间的共价键相互作用强, 绝热转移机制支配电子转移过程, 弱范德瓦尔斯力促使非绝热转移机制主导电子转移过程。电子-空穴复合是影响光电转换效率的另一重要因素, 复合率由能级差、非绝热耦合强度和纯退相三者协同决定。为了提高光电转换效率, 必须实现快速有效的电荷分离, 延缓电子-空穴复合。我们采用非绝热动力学结合含时密度泛函理论, 在时域和原子尺度下模拟了一系列时间分辨的超快光谱实验, 重点强调多种实际因素对真实材料中动力学的影响, 包括缺陷、掺杂、化学键等。具体的体系包括半导体[1]、金属[2]纳米颗粒、石墨烯[3]和 MoS₂[4]敏化的二氧化钛, 范德瓦尔斯异质节[5], 等离子体[6], 以及无机-有机杂化钙钛[7-9]。这些原子尺度的模拟结果得到了多种体系详尽的电子-振动动力学信息、解决了一些争议的问题, 为提高具体材料光捕获能力提供了理论指导。

关键词: 界面电子转移与复合, 钙钛矿, 二氧化钛, 含时密度泛函理论, 非绝热动力学关

- [1] R. Long*, et al., Donor–Acceptor Interaction Determines the Mechanism of Photoinduced Electron Injection from Graphene Quantum Dots into TiO₂: π -Stacking Supersedes Covalent Bonding, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, **139**, 219-2629.
- [2] R. Long, et al., Instantaneous Generation of Charge-Separated State on TiO₂ Surface Sensitized with Plasmonic Nanoparticles, *J. Am. Chem. Soc.*, **2014**, **136**, 4343-4354.
- [3] R. Long, et al., Photo-induced Charge Separation across the Graphene–TiO₂ Interface Is Faster than Energy Losses: A Time-Domain ab Initio Analysis, *J. Am. Chem. Soc.*, **2012**, **134**, 14238-14248.
- [4] Y. Q. Wei, R. Long* et al. Weak Donor–Acceptor Interaction and Interface Polarization Define Photoexcitation Dynamics in the MoS₂/TiO₂ Composite: Time- Domain Ab Initio Simulation, *Nano Lett.* **2017**, **17**, 4038-4046.
- [5] R. Long*, et al., Quantum Coherence Facilitates Efficient Charge Separation at a MoS₂/MoSe₂ van der Waals Junction, *Nano Lett.*, **2016**, **16**, 1996-2003.

- 【6】 Z. S. Zhang, R. Long*, et al. Plasmon-Mediated Electron Injection from Au Nanorods into MoS₂: Traditional versus Photoexcitation Mechanism, *Chem* **2018**, *4*, 1112-1117.
- 【7】 R. Long*, et al., Unravelling the Effects of Grain Boundary and Chemical Doping on Electron–Hole Recombination in CH₃NH₃PbI₃ Perovskite by Time-Domain Atomistic Simulation *J. Am. Chem. Soc.*, **2016**, *138*, 3884-3890.
- 【8】 Z. S. Zhang, R. Long*, et al. Interplay between Localized and Free Charge Carriers Can Explain Hot Fluorescence in the CH₃NH₃PbBr₃ Perovskite: Time-Domain Ab Initio Analysis, *J. Am. Chem. Soc.*, **2017**, *139*, 17327-17333.
- 【9】 Z. S. Zhang, R. Long*, et al. Rapid Decoherence Suppresses Charge Recombination in Multi-Layer 2D Halide Perovskites: Time-Domain Ab Initio Analysis, *Nano. Lett.*, **2018**, *18*, 2459-2466.

G1-09

专题代号： G

黑磷烯中环境退化诱导的局域磁矩的研究

汤怒江，陈杰，都有为

南京大学物理学院，南京 210093

Email: tangnujiang@nju.edu.cn

摘要: 黑磷烯具有和石墨烯相媲美的自旋扩散长度,但又与石墨烯无带隙不同,具有本征的、层数依赖的直接带隙,这使得其在自旋半导体器件应用方面具有更大的潜力【1】。然而,黑磷烯环境下的退化必然发生,只是退化程度随环境条件因素的不同而或多或少,这使得其各种物理性能受环境因素而变化。因此,厘清环境下的退化对其磁性的影响不仅对其磁性研究方面,且对其本征自旋半导体性质的评估,均具有重要意义。

最近,我们通过理论与实验相结合,揭示了黑磷烯中环境退化诱导出磁的自然现象【2】。我们通过设计、控制一系列环境因素(气氛、温度、湿度、光照强度等)和退化时间等,得到一系列不同退化度的样品。磁性表征发现: 1) 质朴的黑磷为本征非磁,环境下样品会诱导出磁,磁矩主要贡献于自旋磁矩; 2) 随着退化程度的不同【如下图所示】,诱导的自旋团簇大小或大或小、数量或多或少,但完全是不可避免的。还发现,环境中的氧气是退化诱导磁的关键因素。他们通过理论模拟与原位电镜表征相结合,提出了黑磷烯在环境下磁结构演

变所经历的三阶段模型。

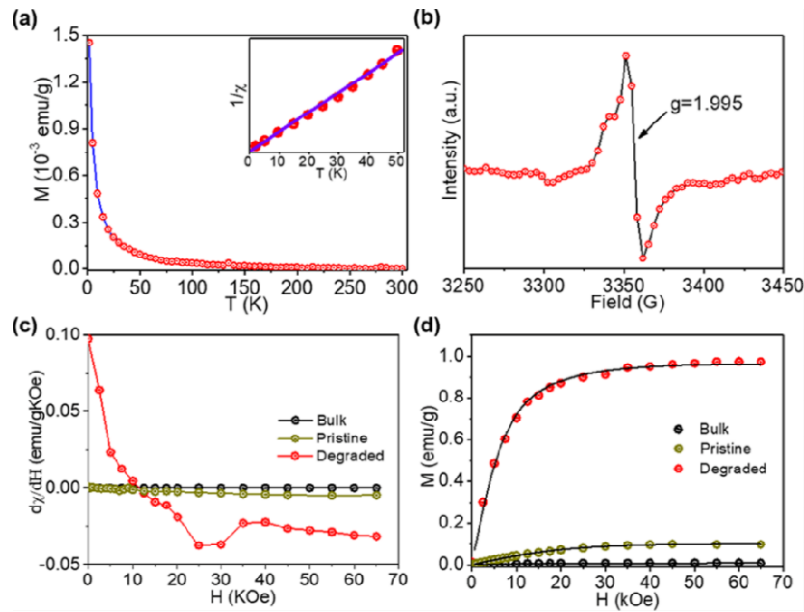


图 1 黑磷烯环境退化诱导的磁性结果。

关键词：黑磷烯，环境退化，磁性

资助项目：国家自然科学基金（51572122），科技部国家重点研发计划（2017YFA0206304）

参考文献

[1] Liu Y.; **Tang N. J.***; Du Y. W., et al. Elemental superdoping of graphene and carbon nanotubes. Nature Communications **2016**, 7, 10921.

[2] Chen J.; **Tang N. J.***; Du Y. W., et al. Ambient degradation-induced spin paramagnetism in phosphorene. Small **2019**, 15, 1804386.

G1-10

专题代号： G

The Novel Transistor and Photodetector of Monolayer MoS₂ Based on Surface-Ionic-Gate Modulation Powered by a Triboelectric Nanogenerator

Lei Zhao¹, Ke Chen^{1,2}, Feng Yang¹, Junmeng Guo¹, Gang Cheng^{1,*},
Zuliang Du^{1,*}

¹Key Lab for Special Functional Materials, Ministry of Education, National & Local Joint Engineering Research Center for High-efficiency Display and Lighting Technology, School of Materials Science and Engineering, and Collaborative Innovation Center of Nano Functional Materials and Applications, Henan University, Kaifeng 475004, China

²School of Physics and Electronics, Henan University, Kaifeng 475004, China

E-mail: chenggang@henu.edu.cn; zld@henu.edu.cn

Abstract:

Modulating the carrier transport behavior by gate voltage is an important strategy for developing electronic and optoelectronic devices. However, the previous gate modulation technologies are generally applied in solid/semiconductor or liquid/semiconductor interface. Here, based on the phenomenon of gas discharge powered by a triboelectric nanogenerator (TENG), the technology of surface ionic gate (SIG) in the gas/semiconductor interface has been proposed, and novel transistor and photodetector of monolayer MoS₂ have been developed by using SIG modulation. In SIG-based transistor, the gas ions generated in gas discharge are adsorbed on monolayer MoS₂, which act as the gate to modulate the carrier concentration and electrical transport. The modulation results can be controlled step-by-step by the operation cycles of TENG, and a maximum on-off ratio of 10⁴ in current has been obtained. In SIG-based photodetector, the photocurrent recovery time of the monolayer MoS₂ device is about 74ms, which is reduced approximately 90 times compared to that without SIG modulation. In addition, the photocurrent of SIG-based photodetector increases linearly with time during a period of 120 s, which can be used to develop a novel photodetector for luminous flux. The working mechanism of the SIG-based transistor and SIG-based photodetector have been discussed. The SIG technology proposed here can modulate the electrical transport properties and surface local energy band structure of two-dimensional (2D) materials, which provides promising strategy for developing novel 2D electronic and optoelectronic devices.

Keywords: surface-ionic-gate, triboelectric nanogenerator, gas discharge, 2D materials, electronic and optoelectronic nanodevice

G1-11

专题代号: G

电子显微镜研究表面物理

高鹏

北京大学量子材料科学中心和电子显微镜实验室，物理学院，北京大学，北京，
100871

Email: p-gao@pku.edu.cn

基于球差矫正的扫描透射电子显微镜具有丰富的成像、谱学功能，是研究表界面和低维材料的强有力工具。本报告中将介绍两个先进电子显微镜技术在表面物理研究中的实例。1. 利用成像技术，我们能够得到表面及近表面的原子像，在皮米精度上局域地测量离子之间的键长。我们研究了四方 $\text{PbZr}_{0.2}\text{Ti}_{0.8}\text{O}_3$ 薄膜中的表面的极化屏蔽机制，测量了表面薄层中“铁电死层”的厚度并且与极化取向的依赖关系【1】。我们也发现非铁电材料 SrTiO_3 的表层会出现极化【2】。该方法的优点是不依赖于样品的导电性，适用于绝缘材料表面结构的研究，是对常规的导体表面研究手段如 STM、低能电子衍射等是一个很好的补充。2. 基于单色仪球差矫正电镜的电子能量损失谱技术，除了亚埃级的高空间分辨率，能量分辨率也达到亚 10meV，从而使得我们能够测量局域晶格振动，研究表界面的振动模式。我们测量了 SiO_2 薄膜的表面、体、界面振动模式，分析了其空间依赖的能量、强度分布【3】。此外，我们测量了单根 ZnO 纳米线的远红外区间表面声子极化激元【4】，揭示了尺寸效应、几何形状效应等。由于传统的光学测量手段缺少远红外区间的激光器和探测器，基于单色仪球差矫正电镜的电子能量损失谱能够很好地弥补这块空白，促进声子极化激元的研究。

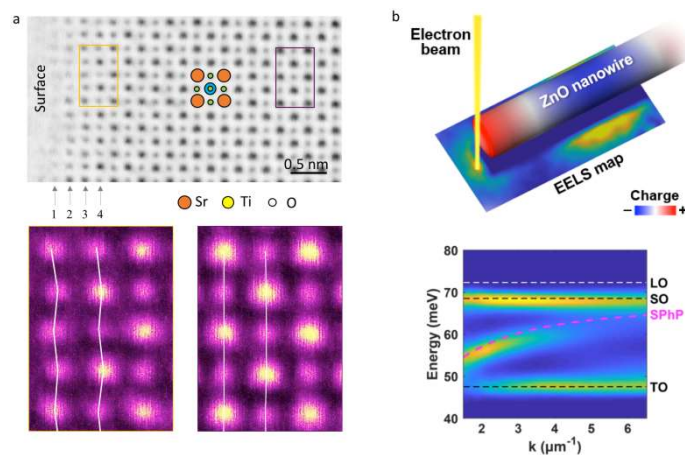


图 1 (a) SrTiO_3 表面原子结构。(b) 电子能量损失谱测量单个 ZnO 纳米线的表面声子极化激元。

关键词：球差矫正电镜 表面 原子像 电子能量损失谱 振动谱 表面极化激元

参考文献

- 【1】 Nature Commun. 7, 11318 (2016)。【2】 Chin. Phys. Lett. 36, 026801 (2019)。【3】 ArXiv 1811.02780(2018)。
【4】 Nano Lett. 19, 5070 (2019)

基金项目：国家自然科学基金项目（NO. 51672007）；国家重点研发计划（NO. 2016YFA0300804）

G1-12

专题代号： G

铜氧化物铜氧面的扫描隧道显微学研究

宋灿立

清华大学物理系，北京 100084

Email: clsong07@mail.tsinghua.edu.cn

摘要：非常规铜氧化物高温超导体的奇异物性及微观超导机理是凝聚态物理领域最具挑战性的前沿科学问题。本报告将主要介绍我们最近基于分子束外延技术制备铜氧化物高温超导体中铜氧面以及原子尺度上表征铜氧面电子结构的实验进展^[1-4]。我们成功制备出单层铜氧薄膜以及以铜氧面终止的无限层型铜氧化物薄膜，并实行对其掺杂量的精确控制。原位的扫描隧道显微镜研究发现铜氧化物中各项同性配对对称性和类半导体调制掺杂电荷转移机制的实验证据，不同于之前对电荷库层的谱学研究。我们的实验结果为最终理解层状铜氧化物的高温超导机理以及新奇物性提供了重要的实验基础。

关键词：铜氧面，扫描隧道显微镜，分子束外延，调制掺杂，配对对称性

【1】 Y. F. Lv et al., Mapping the electronic structure of each ingredient oxide layer of high-Tc cuprate superconductor $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$. Phys. Rev. Lett. 2015, 115, 237002.

【2】 Y. F. Lv et al., Electronic structure of the ingredient planes of the cuprate superconductor $\text{Bi}_2\text{Sr}_x\text{CuO}_{6+\delta}$: A

comparison study with $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$. Phys. Rev. B 2016, 93, 140504(R).

【3】Y. Zhong et al., Nodeless pairing in superconducting copper-oxide monolayer films on $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$. Sci. Bull. 2016, 61, 1239-1247.

【4】Y. Zhong et al., Direct visualization of ambipolar Mott transition in cuprate CuO_2 palens. arXiv: 1904.12280 (2019)

G1-13

专题代号： G

利用扫描隧道显微镜研究 30° 准晶石墨烯

闫超、马冬林、乔佳斌、钟浩源、杨林、李思宇、符中秋、张钰、何林

北京师范大学物理学系，北京 100875

Email : helin@bnu.edu.cn

摘要: 双层石墨烯是最简单的范德瓦尔斯“异质”结, 通过改变双层石墨烯两层间的扭转角度, 可以实现单层石墨烯所不具有的新奇物理性质。最近研究表明, 当双层石墨烯扭转角恰好为 30° 时, 可以形成一种新的二维准晶体。这种由两片石墨烯产生的准晶结构, 其原子排列完美, 并且将准晶性质和石墨烯的相对论性质巧妙地结合在一起, 引起了人们的广泛关注。

我们利用转移两层单晶石墨烯的方法, 成功制备出了高质量的 30° 准晶石墨烯样品, 并利用扫描隧道显微镜技术对其进行了表征。通过测量其原子分辨的 STM 图, 我们直观探测到了 30° 准晶石墨烯所具有的 12 重旋转对称性。在强磁场存在时, 我们观测到了无质量狄拉克费米子朗道量子化行为, 表明 30° 转角石墨烯是相对论性的狄拉克费米子准晶体。同时, 30° 转角石墨烯存在较强的层间耦合, 使得我们在隧道谱上观测到原始狄拉克锥与镜像狄拉克锥相交所打开的能隙。此外, 在无缺陷存在时, 30° 准晶石墨烯中存在很强的谷间散射, 这表明 30° 准晶石墨烯的电学性质与单层石墨烯有很大的差异。

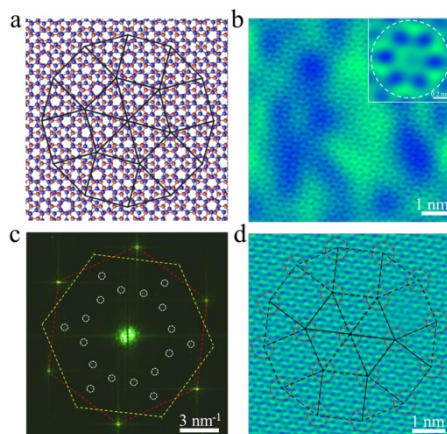


图 1 石墨烯准晶的扫描隧道显微镜图像。a. 30°转角石墨烯的模型图; b. 石墨烯准晶的扫描隧道显微镜图像; c. b 图的傅里叶变换; d. c 图的反向傅里叶变换。

关键词：石墨烯、准晶、扫描隧道显微镜、朗道能级、谷间散射

参考文献

【1】 Ahn, S. J. et al., Dirac Electrons in a Dodecagonal Graphene Quasicrystal. *Science* 2018, 361 (6404), 782–786.

【2】 Yao, W. et al., Quasicrystalline 30° Twisted Bilayer Graphene as an Incommensurate Superlattice with Strong Interlayer Coupling. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2018, 115 (27), 6928–6933.

基金项目：国家自然科学基金项目（NO.11674029, 11422430, 11374035）等

G1-14

专题代号： G

铈钕铜氧薄膜中缺陷态的扫描隧道显微镜/谱研究

范嘉琪，王树泽，于雪晴，宋灿立，马旭村，薛其坤

单位地址：北京市海淀区清华大学物理系

邮编：100084

电子邮箱：fjq16@mails.tsinghua.edu.cn

摘要：自铜氧化物高温超导体被发现以来，高温超导现象吸引了众多物理学家的广泛关注。

然而由于复杂的晶体和能带结构，铜氧化物高温超导电性的微观机理至今仍是众说纷纭。为了解决这一难题，我们利用分子束外延技术制备了铈掺杂的无限层铜氧化物 SrCuO_2 薄膜，并开展了原子尺度上的扫描隧道显微镜/谱研究。结果表明，该薄膜样品的终止表面为原子级平整的铜氧层，具有 1.3 eV 左右的电荷转移能隙，且在费米能级处存在 U 型的超导能隙。铜氧层中的缺陷态附近的扫描隧道显微谱测量表明，铜氧层的电子结构非常稳定，电荷库层的缺陷态不会影响铜氧层的电子结构，只会产生一个局域费米能级的移动。这些实验结果揭示了铜氧化物中类半导体异质结的调制掺杂机制。

关键词：分子束外延，扫描隧道显微镜，铜氧化物，高温超导

感谢科技部基金委的支持！

G1-15

专题代号： G

Pt(111)表面水的核量子效应研究

郭静

北京师范大学化学学院，北京 100875

Email: jguo1294@bnu.edu.cn

摘要：微观粒子具有波粒二象性，可以用波函数来描述，即表现出量子特性。氢原子是质量最小的原子，其核量子效应（量子隧穿和零点运行）在室温下就非常显著，对于物理、化学、生物等诸多领域都有着不可忽视的影响。氢核的量子隧穿效应是酶能够显著提高反应速率的一个重要机制；同时量子隧穿可以调控有机化学反应速率和路径；此外，量子隧穿是星际宇宙中众多有机分子得以合成的基础。目前，这些化学过程中量子隧穿效应的研究主要集中在气相和体相，而表/界面的研究相对较少，并且非常缺乏原子尺度的理解和认识。作为获得清洁能源的一个主要途径，表界面催化水的分解得到非常广泛的关注，然而往往忽略了核量子效应的影响。

研究发现，Pt(111)表面上水的浸润层完全背离了经典的双层冰模型，而是由五元环、六元环和七元环交替拼接而成的 $\sqrt{37} \times \sqrt{37}$ -R25.3°氢键网络结构；经过低温退火 (<150 K)，Pt(111)表面上水发生结构相变，转变为六角氢键网络结构。通过高分辨非接触原子力显微镜

(nc-AFM) 成像以及 X 射线光电子能谱实验发现, Pt(111) 表面上水发生部分分解, 形成 3×3 相 H_2O 和 OH 混合的氢键网络结构, 其中 $\text{H}_2\text{O}:\text{OH}=5:1$ 。进一步探测不同退火温度下水的分解速率, 获得阿伦尼斯曲线 ($\ln k \sim 1/T$) 及其动力学同位素效应, 发现低温下氢核的量子隧穿效应协助水的分解, 同时耦合了振动激发的水的氢键网络的重组效应。该工作表明核量子效应有望为调控化学反应的速率和路径, 降低多相催化反应温度, 提供一条新的路径。

关键词: 扫描隧道显微镜, 原子力显微镜, 表面催化水分解, 亚分子级成像, 核量子效应

G1-16

专题代号: G

二维单元素类石墨烯拓扑材料锡烯的制备与表征

赵爱迪*

中国科学技术大学 合肥微尺度物质科学国家研究中心

安徽省合肥市金寨路 96 号, 中国

*Email: adzhaio@ustc.edu.cn

摘要: 除了石墨烯外, 很多主族元素也可以形成类似石墨烯的稳定单层结构, 并且具有丰富的物理化学性质及广阔的应用前景。其中在物理学中最引人注目的是理论预言在这些材料中预言存在的二维拓扑物性。单元素类石墨烯二维材料已经经历了十余年的研究进程, 目前已经理论发现和实验制备出了若干新型二维拓扑材料, 成为当前凝聚态物理和新材料领域重要研究方向之一。其中, 理论预言锡烯中可通过自旋轨道耦合作用打开百毫伏量级的拓扑能隙, 有望未来用于实现室温量子自旋霍尔效应。近年来, 我们发展了原子级精度的分子束外延的方法以精细控制锡、锑等原子在表面的吸附和扩散, 在多种表面上外延制备出高质量的单层纯平锡烯[1]、翘曲结构锑烯和锡烯[2, 3], 并结合扫描隧道显微学 (STM) 和角度分辨光电子能谱 (ARPES) 等方法研究了这些单层单元素类石墨烯材料的结构与电子结构。通过结合第一性原理的理论计算, 我们证明了 $\text{Cu}(111)$ 表面上纯平锡烯单层薄膜具有显著的拓扑特征, 在 Γ 点处存在拓扑能带反转并打开 300 meV 的拓扑能隙。这是首次在第四主族类石墨烯的纯平材料中实现这一新奇性质。进一步的理论计算还预言了在纯平结构的锗烯和铅烯中也存在类

似的拓扑特性，从而构成了一类新型的二维拓扑材料家族。

关键词：锡烯锑烯二维拓扑材料类石墨烯分子束外延

参考文献：

[1] Epitaxial growth of ultraflat stanene with topological band inversion. J. Deng, A. Zhao*, Y. Xu*, W. Duan, S.-C. Zhang, B. Wang* & J. G. Hou, Nature Materials 17, 1081 (2018).

[2] Epitaxial growth of highly strained antimonene on Ag (111). Y. Mao, L. Zhang, H. Wang, H. Shan, X. Zhai, Z. Hu,* A. Zhao,* Bing Wang, Front. Phys. 13, 138106 (2018).

[3] Electron resonators in bilayer stanene grown on copper oxide surfaces, Y. Mao, H. Shan, A. Zhao*, unpublished.

基金项目：国家重点研发计划(2017YFA0205004, 2018YFA0305603)

G1-17

专题代号： G

单层 VTe₂ 中电荷密度波及其对称性问题的实空间研究

苗光耀、薛思玮、李博、林子荐、刘冰、朱学涛、王炜华、郭建东

中国科学院物理研究所，北京 1000190

Email: lxztzhu@iphy.ac.cn; weihuawang@iphy.ac.cn.

摘要：最近钒的二硫族化合物单层膜中的电荷密度波的研究引起了人们的广泛兴趣，对于 VTe₂ 单层中 CDW 状态的对称性破坏的实空间研究仍然缺乏。我们用分子束外延的方法以外延在 6H-SiC(0001)上的石墨烯为衬底生长了高质量的单层 VTe₂ 薄膜。通过低能电子衍射 (LEED)和扫描隧道显微镜 (STM)研究了 VTe₂ 单层中的 CDW。LEED 实验揭示了在 192±2 K 处的 (4×4) CDW 转变，低温 STM 分辨出了实际空间中的 (4×4) 晶格畸变和电荷密度调制，并进一步揭示了一个一维的调制在 CDW 状态下打破了 3 次旋转对称性。扫描隧道谱 (STS) 在 4.9K 下探测到一个 12meV 的 CDW 能隙。我们的工作提供了关于 (4×4) CDW 状态对称性破坏明确的实空间证据。暗示着 VTe₂ 单层中的 CDW 的形成可能存在着除了常

规的费米表面嵌套（FSN）和电声耦合（EPC）机制之外的因素在起作用。

关键词：电荷密度波，TMD

参考文献

- [1] G. Grüner, Rev. Mod. Phys. **60**, 1129 (1988).
- [2] A. M. Gabovich, A. I. Voitenko, T. Ekino, M. S. Li, H. Szymczak, and M. Pękała, Adv. Condens. Matter Phys. **2010**, 681070 (2010).
- [3] P. Monceau, Adv. Phys. **61**, 325 (2012).
- [4] C.-W. Chen, J. Choe, and E. Morosan, Rep. Prog. Phys. **79**, 084505 (2016).
- [5] X. Zhu, J. Guo, J. Zhang, and E. W. Plummer, Adv. Phys.: X **2**, 622 (2017).

基金项目： National Key Research & Development Program of China (Nos. 2016YFA0300600 and 2016YFA0202300).

National Natural Science Foundation of China (No. 11874404)

Youth Innovation Promotion Association of Chinese Academy of Sciences (No. 2016008).

BAQIS Research Program No. Y18G09.

G1-18

专题代号： G

超高居里温度的二维铁磁 $\text{Fe}_{5+x}\text{GeTe}_2$

李子晗、刘姗姗、修发贤

复旦大学物理学系，表面物理国家重点实验室，上海 200438

Email: Faxian@fudan.edu.cn

摘要：随着二维材料家族的不断丰富，诸如二维过渡金属硫化物、二维超导材料、二维磁性材料等新型材料相继被发现【1】。其中，二维磁性材料的诞生对于低维磁性系统的研究有着重要意义，同时在自旋电子学器件方面也有着潜在的应用价值。因此，二维磁性材料领域的发展一直备受关注。找到颇具应用价值的新型二维磁性材料并探寻物理机制是该领域的重大

研究目标。近期，人们在二维磁性材料 Fe_3GeTe_2 中通过多种方法，成功实现了室温的二维磁性。但由于方法的局限性，二维磁性材料的室温应用还具有很大的挑战性。为了解决样品尺寸和低居里温度的难题，我们采用了分子束外延的生长方法，进行 $\text{Fe}_{5+x}\text{GeTe}_2$ 薄膜的生长制备。基于分子束外延的生长优势，我们制备了晶圆级的 $\text{Fe}_{5+x}\text{GeTe}_2$ 薄膜，同时可以对铁的组分进行精细的掺杂调控，从而进一步实现样品的磁性调控。在不同铁组分的掺杂中， $\text{Fe}_{5+x}\text{GeTe}_2$ 薄膜样品最高能达到 380 K 的居里温度，成功实现了超越室温的二维铁磁性【2】。在实验过程中，我们利用输运测量、磁矩测量等多种测量手段，多方位确认了高温的二维铁磁性。分子束外延的生长方法具备生长晶圆级样品的能力，可以精确调控二维铁磁材料的居里温度，因此为这类材料室温器件应用提供了新的思路。

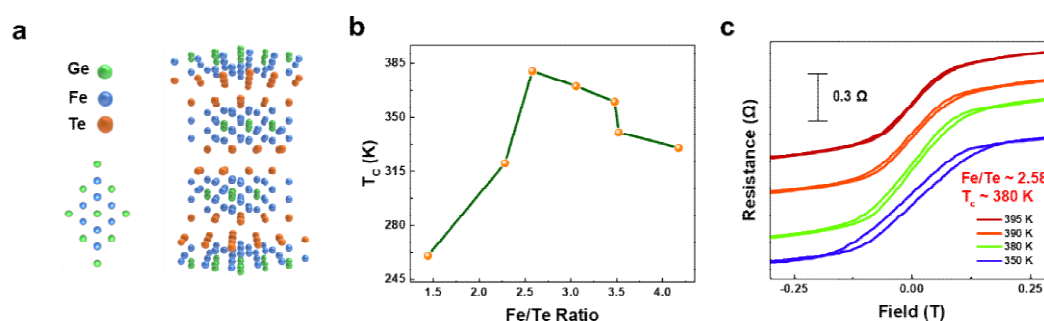


图 1 二维铁磁材料 $\text{Fe}_{5+x}\text{GeTe}_2$ 的晶体结构(a)，居里温度调控(b)与输运测量结果(c)

关键词：二维磁性 超高居里温度 掺杂

参考文献

【1】 Y. J. Deng et al., Gate-tunable Room-temperature Ferromagnetism in Two-dimensional Fe_3GeTe_2 , Nature, 2018, 563, 94–99.

【2】 Z. H. Li et al., Ultrahigh Curie temperature in 2D ferromagnetic $\text{Fe}_{5+x}\text{GeTe}_2$ thin films, submitted, 2019

基金项目：国家自然科学基金（11474058, 11874116, 61674040）

G1-19

专题代号： G

二维铁磁 Fe_3GeTe_2 的大规模外延生长及室温磁性

刘姗姗，杨柯，张晓倩，刘文清，徐永兵，邹进，吴骅，修发贤

复旦大学物理学系，表面物理国家重点实验室，上海200438

Email: Faxian@fudan.edu.cn

摘要:近期,层状二维铁磁材料由于其在低维磁性研究和自旋电子器件应用的前景引起了广泛关注。由机械剥离方法得到的单层材料实验上被证明仍具有铁磁性,因此在低维度下研究材料的磁性是非常重要的。由于维度效应,随着样品减薄,样品尺寸被局限于几十微米的量级且居里温度急剧下降到液氮温度以下。因此对于二维材料的研究,如何获得大面积、高质量、高居里温度的样品极为重要。这里,我们通过分子束外延进行了二维铁磁薄膜 Fe_3GeTe_2 的晶圆尺寸生长(2 英寸),并进而通过控制 Fe 的组成得到了高于室温的磁性【1】。二维逐层生长模式由原位反射高能电子衍射强度的周期性振荡证明。随着样品厚度的减小,居里温度呈下降趋势,四层 Fe_3GeTe_2 的居里温度为 142 K。研究发现,通过 Fe 元素掺杂,材料的居里温度连续调控,最高可提升到 320 K。通过磁圆偏振二色谱,我们证明高居里温度的磁性仍来自于 Fe_3GeTe_2 并排除了 Fe 原子簇的存在。大规模逐层生长和可操控磁性使 Fe_3GeTe_2 有望应用于自旋电子学及相应的器件研究。可控、大面积的生长还为探索丰富的物理现象及理论提供了极大帮助,如与二维超导材料和拓扑材料的结合。

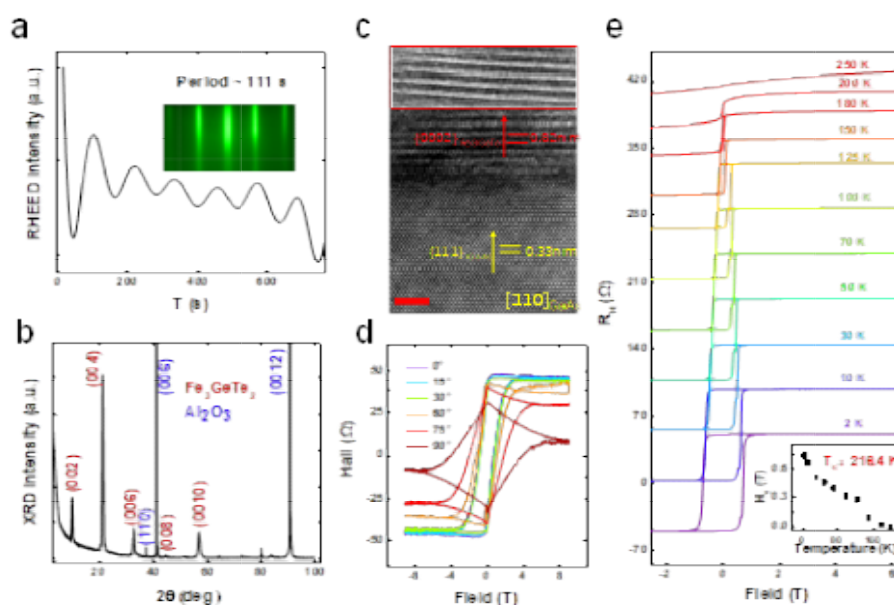


图 1 (a)二维铁磁 Fe_3GeTe_2 的逐层生长模式;高质量单晶通过 XRD (b)和 TEM (c)得到证实;(d)和(e)分别为 2.5K 下的角度和温度依赖的反常霍尔测试, e 的插图为不同温度下的矫顽场。

关键词: 大规模生长, 二维铁磁 Fe_3GeTe_2 , 室温铁磁性, 磁圆偏振二色谱

参考文献

【1】 S. Liu et al., Wafer-Scale Two-Dimensional Ferromagnetic Fe_3GeTe_2 Thin Films Grown by Molecular Beam Epitaxy, Npj 2D Mater. Appl. 2017, 1 (1), 30

基金项目: 国家自然科学基金 (11474058, 11874116, 61674040)

范德华-约瑟夫森结中的磁性层隧穿特性研究

艾临风、黄策、张恩泽、修发贤

复旦大学物理学系，表面物理国家重点实验室，上海200438

Email: Faxian@fudan.edu.cn

摘要：近年来，超导-铁磁界面特性的研究是凝聚态物理的一个重要课题，其中包括研究自旋三重态配对、自旋取向导致的极化超导电流和在铁磁约瑟夫森结中实现超导相位 $0-\pi$ 的转变等【1】。而自石墨烯被发现以来，二维层状材料中出现了二维超导与铁磁材料，因其易解离特性和厚度依赖的物理性质，为研究基于范德华作用的超导-铁磁异质结提供了绝佳的平台。在层状磁性材料中，层与层之间的自旋极化和耦合强弱会影响库珀电子对在其中的隧穿过程，表现为超导关联作用的层数依赖行为。

我们采用二维堆垛技术制备了以铁磁绝缘体作中间层的约瑟夫森结器件，并于薄层中 ($<10\text{nm}$) 观察到无耗散磁性隧穿的约瑟夫森耦合，其结区界面的散射效应较低。同时我们观察到器件中超导临界电流随磁场扫描方向的回滞特性，这不同于铁磁材料矫顽场的作用，其与取向相反的自旋在隧穿中感受到的势垒高度不同相关【2】。进一步增大磁场时，我们发现临界电流出现非连续变化的跳变，表现出自旋高度极化的隧穿层对超导电子对关联的抑制。

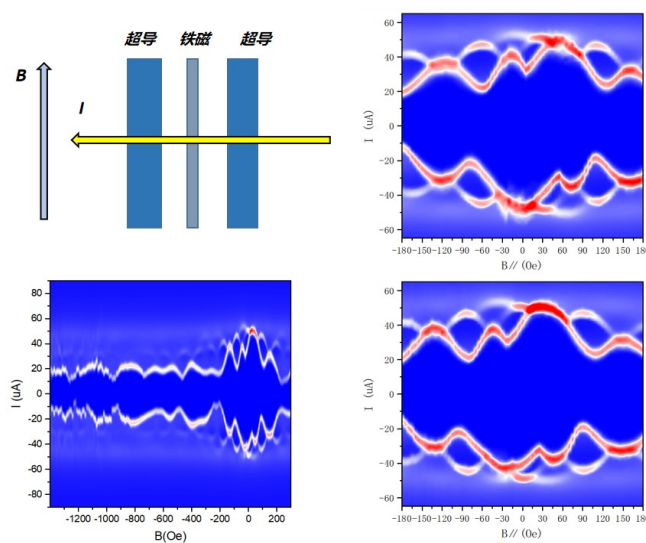


图 1 范德华-约瑟夫森结的磁隧穿特性

关键词：约瑟夫森结 磁性隧穿

参考文献

【1】 [T. Kontos](#) et al., Inhomogeneous Superconductivity Induced in a Ferromagnet by Proximity Effect, Phys.Rev.Lett. 2001, 86(2), 304-307.

【2】 [Kartik Senapati](#) et al., Spin-filter Josephson junctions, Nature. Mater. 2011, 10(11), 849-852.

基金项目：国家自然科学基金（11474058, 11874116, 61674040）

G1-21

专题代号： G Decaying Majorana oscillations induced by
steplike spin-orbit coupling

卢海舟

南方科技大学

The Majorana zero mode in the semiconductor-superconductor nanowire is one of the promising candidates for topological quantum computing. Recently, in islands of nanowires, subgap-state energies have been experimentally observed to oscillate as a function of the magnetic field, showing a signature of overlapped Majorana bound states. However, the oscillation amplitude either dies away after an overshoot or decays, sharply opposite to the theoretically predicted enhanced oscillations for Majorana bound states. We reveal that a steplike distribution of spin-orbit coupling in realistic devices can induce the decaying Majorana oscillations, resulting from the coupling-induced energy repulsion between the quasiparticle spectra on the two sides of the step. This steplike spin-orbit coupling can also lead to decaying oscillations in the spectrum of the Andreev bound states. For Coulomb-blockade peaks mediated by the Majorana bound states, the peak spacings have been predicted to correlate with peak heights by a $\pi=2$ phase shift, which was ambiguous in recent experiments and may be explained by the steplike spin-orbit coupling. Our work will inspire more works to reexamine effects of the nonuniform spin-orbit coupling, which is generally present in experimental devices.

参考文献:

Zhan Cao, Hao Zhang, Hai-Feng Lü, Wan-Xiu He, Hai-Zhou Lu*, X. C. Xie, "Decays of Majorana or Andreev oscillations induced by steplike spin-orbit coupling", Phys. Rev. Lett. 122, 147701 (2019).

G1-22

专题代号: G

Atomically thin magnetic metal halides and chalcogenides grown by molecular beam epitaxy

DingyongZhong (钟定永)^{1,*}

¹ School of Physics and State Key Laboratory for Optoelectronic Materials and Technologies, Sun Yat-sen University, Guangzhou, China

*dyzhong@mail.sysu.edu.cn

Magnetic spins are one of the most fundamental factors in condensed matters and play a key role in many important properties such as magnetism, multiferrotics and superconductivity. Magnetic materials have long been used in industry and daily life. The magnetic-spin related behaviors are also considered for the potential applications in spintronics and quantum computing. Two-dimensional (2D) magnetic materials, a member of the family of versatile 2D materials, are new and simple platforms for investigating magnetic-spin related behaviors. However, so far the available 2D magnetic materials, mainly prepared by mechanical exfoliation, are very rare. In this talk, I will present our efforts on the growth of various 2D magnetic transition-metal halides and chalcogenides with atomic thickness by state-of-the-art molecular-beam epitaxy technique. The atomic structures, local electronic and spintronic properties are studied by high-resolution scanning tunneling microscopy/spectroscopy and first-principles density functional theory calculations. Our study paves the way for exploring new 2D magnetic systems (including ferromagnetic, antiferromagnetic, quantum spin liquid, etc.), discovering novel spin-related behaviors in low-dimensional systems, and constructing new physical models for collective

interactions in condensed matters with magnetic spins.

G1-23

专题代号: G

Topological mosaics in moiré superlattices of van der Waals heterobilayers

童庆军

湖南大学物理与微电子科学学院, 长沙 410082

Email: tongqi@hnu.edu.cn

摘要: Van der Waals (vdW) heterostructures formed by two-dimensional atomic crystals provide a powerful approach towards designer condensed matter systems. Incommensurate heterobilayers with small twisting and/or lattice mismatch lead to the interesting concept of moiré superlattices, where the atomic registry is locally indistinguishable from commensurate bilayers but has local-to-local variation over long range. In this talk, I show that such moiré superlattices can lead to periodic modulation of local topological order in vdW heterobilayers formed by two massive Dirac materials. By tuning the vdW heterojunction from normal to the inverted type-II regime via an interlayer bias, the commensurate heterobilayer can become a topological insulator (TI), depending on the interlayer hybridization controlled by the atomic registry between the vdW layers. This results in a mosaic pattern of TI regions and normal insulator (NI) regions in moiré superlattices, where topologically protected helical modes exist at the TI/NI phase boundaries. By using symmetry-based k.p and tight-binding models, we predict that this topological phenomenon can be present in inverted transition metal dichalcogenides heterobilayers. Our work points to a new means of realizing programmable and electrically switchable topological superstructures from two-dimensional arrays of TI nano-dots to one-dimensional arrays of TI nano-strips.

关键词: 2D materials, van der Waals heterostructure, moiré pattern, topological insulator, spintronics

参考文献: 【1】 Qingjun Tong, Hongyi Yu, Qizhong Zhu, Yong Wang, Xiaodong Xu, and Wang Yao, Nature Physics 13, 356 (2017).

G1-24

专题代号: G

Direct probing of imperfection-induced electrical degradation in millimeter-scale graphene on SiO₂ substrates

Rui-Song Ma¹, Jiajun Ma¹, Lihong Bao¹, Hong-Jun Gao^{1,*}

¹ Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, PO Box 603, Beijing 100190, People's Republic of China

*Email: hjgao@iphy.ac.cn

Abstract:

In large-scale electronic applications of graphene, imperfections play a key role in controlling the electrical properties. Here we directly probe the electrical-degradation effects induced by wrinkles, grain boundaries, multilayered islands, cracks, holes, and adsorbates on millimeter-scale graphene on a SiO₂/Si substrate using a four-probe scanning tunneling microscope. By comparing the local measurements near and far away from these imperfections, we quantify their impact on the most important figures of merit including sheet resistance, carrier mobility, and residual carrier-density variations in the vicinity of the imperfections. Angle-dependent measurements via a van der Pauw geometry are then performed to determine the influence of imperfections on the whole graphene flake. A key result is that, as long as the imperfections do not extend continuously over the entire flake, the overall electrical properties of a graphene flake are not distinctly impacted by the imperfections because carriers find the paths of least resistance. The four-probe

method can also be extended to evaluate the degradation effects on electrical-transport properties in other two-dimensional materials.

Keywords: graphene, degradation, imperfections, four-probe measurements, electrical properties

References:

- 【1】 Ma, R. S. et al. Direct probing of imperfection-induced electrical degradation in millimeter-scale graphene on SiO₂ substrates, *2D Mater.* in press <https://doi.org/10.1088/2053-1583/ab34fb>.
- 【2】 Ma, R. S. et al. Direct Four-Probe Measurement of Grain-Boundary Resistivity and Mobility in Millimeter-Sized Graphene, *Nano Lett.* **2017**, **17**: 5291
- 【3】 Ma, R. S. et al. Upgrade of a Commercial Four-Probe Scanning Tunneling Microscopy System, *Rev. Sci. Instrum.* **2017**, **88**: 063704.
- 【4】 Ma, R. S. et al. Direct measurements of conductivity and mobility in millimeter-sized single-crystalline graphene via van der Pauw geometry, *Chin. Phys. B* **2017**, **26**: 066801.

Funding:

This work was supported by grants from National Key Research & Development Projects of China (Nos. 2016YFA0202300 and 2018FYA0305800), National Natural Science Foundation of China (Nos. 61674170 and 61888802), the Strategic Priority Research Program of Chinese Academy of Sciences (Nos. XDB30000000, XDB28000000), and Youth Innovation Promotion Association of CAS (20150005).

G1-25

专题代号: G

Prevalent 2D vertical ferroelectricity in van der Waals bilayer:
interlayer sliding, magnetoelectric coupling and Moire pattern

Menghao Wu

School of Physics, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, 430074

Email: wmh1987@hust.edu.cn

We report the first-principles evidence of 2D vertical ferroelectricity induced by interlayer translation, which exists extensively in graphitic bilayer of BN, ZnO, MoS₂, GaSe, etc.; the bilayer of some 2D ferromagnets like MXene, VS₂ and MoN₂ can be even multiferroics with switchable magnetizations upon ferroelectric switching, rendering efficient reading and writing for high-density data storage. Especially, the electromechanical coupling between interlayer translation and potential can be used to drive the flow of electrons as nanogenerators for harvesting energy from human activities, ocean waves, mechanical vibration, etc.. Ferroelectric superlattice with spatial varying potential can be formed in bilayer Moire pattern upon a small twist or strain, making it possible to generate periodic n/p doped domains and shape the periodicity of the potential energy landscape. Finally, some of their multilayer counterparts with wurtzite structures like ZnO multilayer are revealed to exhibit another type of vertical ferroelectricity with greatly enhanced polarizations.

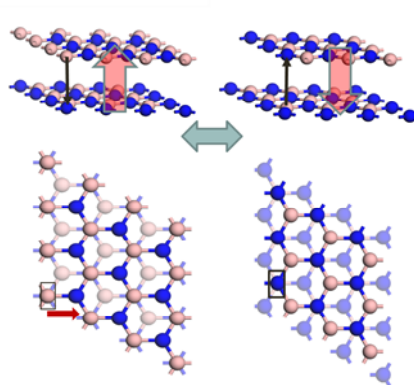


Fig.1 2D vertical ferroelectricity induced by interlayer sliding

Keywords: 2D ferroelectrics/multiferroics; interlayer sliding; van der Waals bilayer; Moire pattern

[1] ACS Nano 11, 6382 (2017)

[2] Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol.Sci. 8, e1365 (2018)

[3] J. Phys. Chem. Lett. 9, 7160 (2018)

G1-26

专题代号： G

Topological states in low dimensional systems

Ying-Shuang Fu¹

¹School of Physics, Huazhong University of Science and Technology

In two dimensional topological insulators, topological edge states are protected by the nontrivial topology of the bulk bands, which support quantum spin Hall effect. While there are many theoretical predications on the two dimensional topological insulators, their experimental identifications are still sparse. With scanning tunneling microscopy and molecular beam epitaxy, we report the experimental observations of the topological edge states in several low dimensional systems, including the step edge of bulk WTe_2 , $\text{Bi}(111)$ thin films and $\text{Na}_3\text{Bi}(001)$ films. The topological nature of the edge states is rigorously supported by first-principles calculations. Our study enriches the topological systems in low dimensional WTe_2 , clarifies controversies on the topological nature of Bi films, and develops an approach for inducing topological phase transitions in Na_3Bi films. These may provide platforms for further in-depth study of their relevant physics and device applications.

G1-27

专题代号： G

氧化物一维有序晶体的结构与物性

陈春林

中国科学院金属研究所

长期以来，人们将固体物质按其对称性分为三大类：晶体、准晶和非晶。晶体具有旋转对称性和平移对称性，其原子有规则地在三维空间呈周期性重复排列。准晶具有旋转对称性，但不具有平移对称性。准晶的原子排列具有长程有序，但不具有三维平移周期性。非晶不具有旋转对称性和平移对称性，其原子排列不具有长程有序。本工作利用扫描透射电子显微术与第一性原理理论计算相结合的方法，在 MgO 和 Nd₂O₃ 薄膜中发现了一种新的固体结构——一维有序晶体。该结构仅在一个方向上保留了晶体的平移对称性和周期性，在其他方向上其原子呈现无序排列，形成了具有一维平移周期性的长程有序结构。一维有序晶体结构单元的原子排列与重位点阵倾转晶界的结构单元非常类似，其物理性质与相应的常见结构类型具有显著差异。

G1-28

专题代号： G

二维纳米阵列的制备及在表面增强光谱的应用

郝祺，李明泽，彭朝辉，邱腾

东南大学物理学院，南京 211189

Email: haoqihq@163.com

摘要：表面增强光谱技术是纳米光子学中常用的电场增强技术，它利用光来激发纳米金属材料中的电子从而实现光与电能之间的转化。当光与电子的振动频率相匹配时，共振会导致强烈的电子振动，并在材料周围形成强烈的电磁场，我们称之为局域等离激元增强电场。受到增强电场的作用，处于电场中的分子的发光特性会发生极大变化，与之相关的研究即表面增强光谱学。表面增强光谱学被广泛的应用于提升材料的发光效率，增强分子的拉曼散射，并用于检测，成像，原位分析等领域。

课题组团队开发与制备了多孔阳极氧化铝（AAO）纳米模板，并精确控制了纳米模板中纳米孔的深度和宽度。利用这一模板，课题组成功制备了具有微小间距（< 10 nm）的纳米二聚体，并把增强电场汇聚在狭小的间距中，使得其增强电场强度进一步提升。这种方法可以应用于制备大尺度、可转移的等离激元芯片，从而用于表面增强拉曼散射（SERS），表面增强光致发光以及表面增强局域加热等领域。课题组团队在此基础上，进一步研究了将此

技术用于原位单分子检测以及吸附过程中的拉曼光谱学衍变。

关键词：表面增强拉曼散射（SERS），多孔阳极氧化铝（AAO），等离激元（plasmon），纳米阵列，纳米光子学（nanophotonics）

- 【1】 Q. Hao et al., VO₂/TiN Plasmonic Thermochromic Smart Coatings for Room-Temperature Applications. *Adv Mater* 2018, 30, 1705421.
- 【2】 Q. Hao et al., Boosting the Photoluminescence of Monolayer MoS₂ on High-Density Nanodimer Arrays with Sub-10 nm Gap. *Adv Opt Mater* 2018, 6, 1700984.
- 【3】 Q. Hao et al., Controlled patterning of plasmonic dimers by using an ultra-thin nanoporous alumina membrane as a shadow mask. *ACS Appl Mater Inter* 2017, 4, 36199–36205.
- 【4】 Q. Hao et al., Facile Design of Ultra-Thin Anodic Aluminum Oxide Membranes for The Fabrication of Plasmonic Nanoarrays. *Nanotechnology* 2017, 28, 105301.

基金项目：国家自然科学基金重大项目（2017YFA0403600），国家自然科学基金面上项目（No. 11874108）等

G1-29

专题代号： G

原子层沉积辅助双界面修饰实现高性能钙钛矿光电探测器

赵传熙、麦文杰

暨南大学理工学院物理系，广州 510000

Email: wenjiamai@email.jnu.edu.cn

摘要：钙钛矿具有优异的光电性能，广泛应用于光电探测领域，然而其探测率和响应度及其环境稳定性仍有待于进一步的提升。原子层沉积(ALD)技术可以实现单原子层厚度可控的薄膜制备，可以有效地对钙钛矿光电器件进行界面调控以提升器件的光电性能，并且其制备的致密薄膜可以有效的实现水氧隔绝，有望提升钙钛矿器件的环境稳定性。

课题组团队通过原子层沉积辅助双界面修饰工程实现了高性能、稳定的无机 CsPbBr₃ 钙钛矿光电探测器的制备。首先在无机 CsPbBr₃ 钙钛矿薄膜沉积前的 FTO 基片预沉积了一层 1.5 nm 厚度的 Al₂O₃，有效地提升了钙钛矿薄膜的结晶质量。然后在 CsPbBr₃ 钙钛矿薄膜上面沉积了 10 nm 的 TiO₂ 薄膜，作为电子传输层，提高了器件的电子抽取能力，提升了器件的光电流。通过 ALD 双界面修饰的 Al₂O₃/CsPbBr₃/TiO₂ 光电探测器件的探测率达到 1.88×10¹³ 琼斯，线性动态范围达到 172.7 dB。由于暗电流得到极大抑制，该光电探测器可以实现超弱光探测，在光强为 4.3 nW cm⁻² 的情况下，仍然有明显的光电响应特性。此外，由于 ALD 制备的致密的 TiO₂ 薄膜在钙钛矿表面形成了一层保护层，器件的在无封装情况下放置 100 天仍然具有 96% 的光电性能，展现出极佳的环境稳定性。

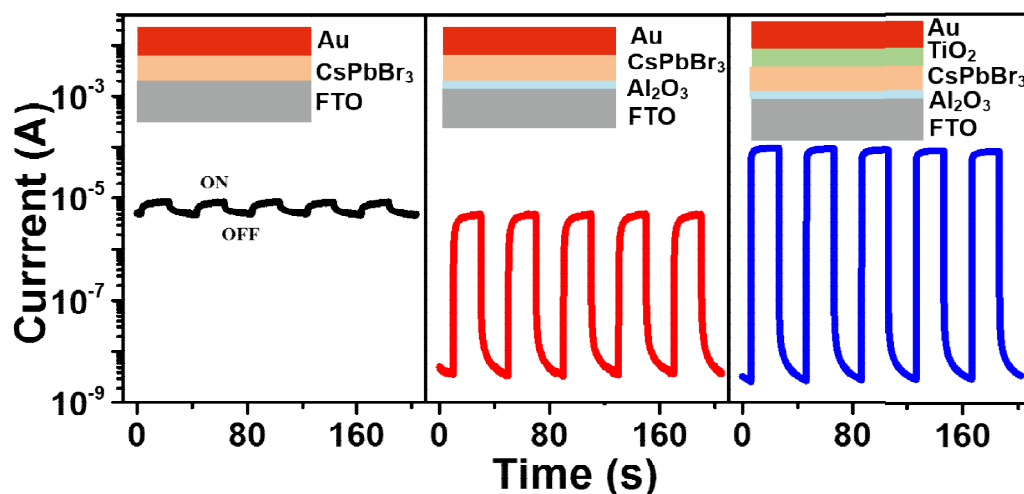


图 1 双界面修饰 CsPbBr₃ 钙钛矿光电探测器瞬态响应性能

关键词：原子层沉积、钙钛矿、光电探测器

- 【1】 W.J.Mai et al., Atomic-Layer Deposition-Assisted Double-Side Interfacial Engineering for High-Performance Flexible and Stable CsPbBr₃ Perovskite Photodetectors toward Visible Light Communication Applications, *Small*, 2019, 1902135.

G1-30

专题代号： G

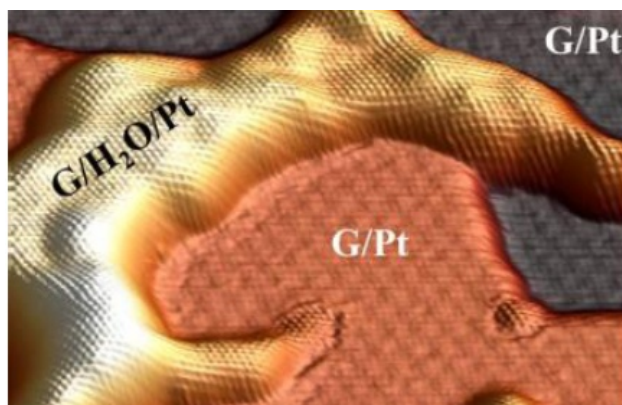
Scanning Tunneling Microscopy of Water Intercalated Graphene on Platinum

李哲

哈尔滨工业大学 (深圳) 理学院 , 深圳 518055

Email: zhe.li@hit.edu.cn

摘要: Water at surfaces and interfaces is of significant interest in multidiscipline research. The presence of water layers has been found at the interface between two-dimensional (2D) materials (e.g., graphene, MoS₂) and various substrates [1]. However, the structure of the confined water and how water intercalation influences the electronic properties of the 2D coating materials has not yet been well characterized in a quantitative way. Here, we use low-temperature scanning tunneling microscopy based techniques to probe the electronic properties of water-intercalated graphene on Pt(111). We find that the graphene becomes highly decoupled from the substrate, allowing us to reveal the intrinsic properties of graphene, i.e., phonons and double Rydberg series of even and odd symmetry image potential states. We also reveal that the graphene exhibits strong p-type doping induced by water intercalation. Our work demonstrates that the electronic properties of graphene can be tuned by the confined water layer at the interface between graphene and the substrate [2].



关键词: graphene, water intercalation, scanning tunneling microscopy

参考文献

- 【1】 P. Bampoulis et al, Water confined in two-dimensions: Fundamentals and applications, Surf. Sci.Rep. 2018, 73(6), 233.
- 【3】 Z. Li et al, Strongly Hole-Doped and Highly Decoupled Graphene on Platinum by Water Intercalation, J. Phys. Chem. Lett. 2019, 10(14), 3998.

基金项目：国家自然科学基金项目（NO. 11704057）

G1-31

专题代号： G

新型二维材料的角分辨光电子能谱研究

冯宝杰

中国科学院物理研究所

过去十几年，以石墨烯为代表的二维材料受到了高度的关注。这些二维材料的出现，为实现纳米尺度精准的量子器件提供了契机。众所周知，材料的能带结构是材料最重要的性质之一，有助于我们深入理解材料的大部分电输运及光电性质。角分辨光电子能谱（ARPES）技术是研究材料电子结构最直接的手段，结合同步辐射技术，可对材料的能带结构、自旋织构以及轨道对称性等信息进行全面、深入的研究。然而，ARPES 测量对于材料表面的洁净程度要求很高，这使得二维材料的研究变得比较困难。这些困难可以通过材料的原位生长及测量来克服。在本次报告中，我将介绍我们最近利用 ARPES 对于几种新型二维材料的研究，包括硅烯、硼烯、单层 Cu_2Si 、单层 GdAg_2 等。在这些二维材料中，我们发现了多种奇特的物性，比如狄拉克锥、狄拉克/外尔节线等。

G1-32

专题代号： G

Tuning transport properties of graphene by in-situ organic molecules and metal atoms deposition

王以林^{1,2*}, Janice Reutt-Robey², Michael Fuhrer³

¹ 山东大学微电子学院，济南 250100

² University of Maryland, College Park, MD, USA 20742

³ Monash University, Melbourne, Australia 3800

*Email: yilinwang@email.sdu.edu.cn

Abstract: Electronic transport properties of graphene are highly sensitive to adsorbates on its surface. Adsorbates can affect graphene through doping, screening and scattering. Here, we study the in-situ transport properties of graphene decorated with neutral dipolar organic molecules (weak interaction) and 5d heavy metal atoms (strong interaction) under ultra-high vacuum condition. Upon warming from 25 K, the electrical conductivity of bilayer graphene with physisorbed CF₃Cl molecules drops abruptly at 47K and exhibit additional inflection points at 60K and 69 K, which are identified as signatures of abrupt phase transitions in the adsorbate overlayer. Adsorption of 5d heavy metal atoms on graphene has been theoretically proposed as an effective means to enhance spin-orbit coupling in graphene. Neutral-current (spin, valley) Hall effect in disordered single-layer graphene was detected by a non-local Hall bar geometry, and disorder is tuned by the addition of Au or Ir adatoms. A reproducible neutral-current Hall effect is found, while short relaxation length and lack of precession in a parallel magnetic field rule out spin as the neutral-current source, and suggest that the neutral current is valley current.

Keywords: graphene; in-situ transport measurement; surface decoration; spin/valley Hall effect

References:

- 【1】 Yilin Wang et al., Electrical detection of CF₃Cl phase transitions on graphene, *Appl. Phys. Lett.*, 2013, 103(20): 201606.
- 【2】 Yilin Wang et al., Electronic transport properties of Ir-decorated graphene, *Scientific Reports*, 2015, 5: 15764.
- 【3】 Yilin Wang et al., Neutral-current Hall effects in disordered graphene, *Phys. Rev. B*, 2015, 92(16):161411(R).

G1-33

专题代号: G

Giant 3D Rashba-like Spin Splitting in PtBi₂

冯娅, 肖绍铸, 吴贤新, 何少龙*

中科院宁波材料所, 浙江宁波, 315201

*Email: shaolonghe@nimte.ac.cn

Spin-orbit coupling (SOC) has gained much attention for its rich physical phenomena and highly promising applications in spintronic devices [Nature 539,509(2016)]. The Rashba-type SOC in systems with inversion symmetry breaking is particularly attractive for spintronics applications since it allows for flexible manipulation of spin current by external electric field. Here, we report the discovery of a giant anisotropic Rashba-like spin splitting along three momentum directions (3D Rashba-like spin splitting) with a helical spin polarization around the M points in the Brillouin zone of trigonal layered PtBi₂, giving rise to novel multiple spin-split electron pockets. Due to its inversion asymmetry and reduced symmetry at the M point, Rashba-type as well as Dresselhaus-type SOC cooperatively yield a giant 3D spin splitting in PtBi₂. The experimental realization of 3D Rashba-like spin splitting not only has fundamental interests but also paves the way to the future exploration of a new class of

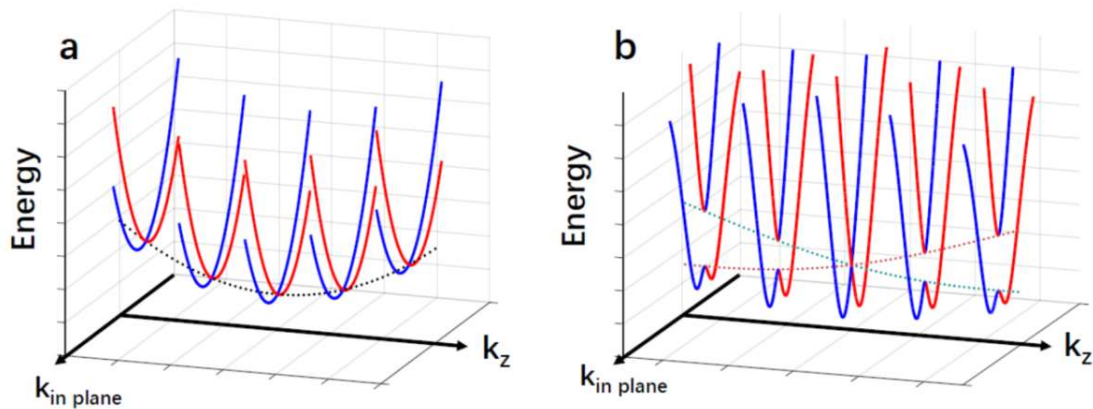


Fig.1: Sketch of th3D Rashba band structures. a. It has dispersion along k_z with spin degenerate along k_z for $k_x=k_y=0$. b. In addition to the dispersion along k_z direction, it shows band splitting along k_z .

参考文献:

[1] Ya Feng et al., Giant anisotropic 3D Rahn-like spin splitting in PtBi₂, (under review in Nature Communications, 2019)

G1-34

专题代号: G

Supported transition metal catalysts on Mo₂C MXene for fuel cells

Cheng Cheng (程成) and Zongxian Yang (杨宗献)

School of Physics, Henan Normal University, Xinxiang, Henan 453007

Email: yzx@henannu.edu.cn)

Abstract: Pt-based catalysts are still the promising catalysts for fuel cells, but their large-scale usage suffers from high cost, low abundance, poor stability, poor oxygen reduction reaction (ORR) reactivity on the cathode and CO poisoning on the anode. By using density functional theory, we select a representative MXene, Mo₂C, to screen out the best supported metal monolayer on Mo₂C (M_{ML}/Mo₂C, M = Cu, Pd, Pt, Ag and Au) as catalysts towards ORR [1], aiming to find a promising catalyst to replace Pt/C catalysts used in the proton exchange membrane fuel cells (PEMFCs). We propose that Au_{ML}/Mo₂C is a promising ORR candidate with good stability, enhanced durability, comparable or even better ORR activity than the commercial Pt/C catalysts. Besides, to improve the CO tolerance of the anode Pt/C catalysts, we study Mo₂C-based single atom catalysts (SACs) [2], single cluster catalysts (SCCs) [3] and single metal monolayer catalysts (SMCs) [4]. We speculate that Zn/Mo₂CO₂ SAC and Cu₃/Mo₂CO₂ SCC can be used as good catalysts for CO removal. Considering the influence of H₂ fuels, we suggest that Ag_{ML}/Mo₂C can be used as a good catalyst for CO removal in H₂ feeds. It can be used not only as a filter membrane connected to the anode of fuel cells for separating H₂ and CO, but also as an efficient catalyst with high selectivity and activity for preferential oxidation of CO in the H₂ feeds. We hope our present studies could advance the development of fuel cells and inspire more applications about MXene catalysts.

References:

- [1] C. Cheng, X.L. Zhang, Z.M. Fu and Z.X. Yang*, J. Phys.: Condens. Matter, 2018, 30, 475201.
- [2] C. Cheng, X.L. Zhang, Z.X. Yang* and K. Hermansson*, Adv. Theory Simul, DOI: 10.1002/adts.201900006.
- [3] C. Cheng, X.L. Zhang, Z.X. Yang*, Z. Zhou, ACS Appl. Mater. Interfaces 2018, 10: 32903.
- [4] C. Cheng, X.L. Zhang, Z.X. Yang*, J. Phys.: Condens. Matter, 2019, 31, 215201.

基金项目：国家自然科学基金项目（NO. 11874141）

G1-35

专题代号： G

层状材料的应变调控与启示

黄元^{1*}，许宏^{1, 2}，苑争一³，黄彤飞⁴

¹ 中国科学院物理研究所，北京，100190

² 中国地质大学（北京）数理学院，北京，100083

³ 中国地震台网中心，北京，100045

⁴ 中国石油勘探开发研究院，北京，100083

*yhuang01@iphy.ac.cn

摘要

应力应变可以有效的改变层状材料的层间耦合、晶格常数，被广泛用于调控材料的能带结构和光电性质。近期，我们发展了在层状材料中制备气泡和褶皱等特殊结构的新方法，在石墨烯、MoS₂和 WSe₂等层状材料中有效的引入了应力场。通过拉曼光谱、荧光光谱和透射电子显微镜等表征手段的研究，我们发现气泡和褶皱形成后会改变材料的层间距，降低材料层间耦合，多层材料会展现出不同于平整单层和多层的特殊性质。在褶皱的交汇点，我们发现材料的化学反应活性明显提高。褶皱结构在日常生活以及自然界中非常常见，它们应力应变下的行为与层状晶体材料有非常多相似之处。受到层状材料应变调控的启示，我们分析了地球上地质活动的可能性机理，对地震和火山等地质活动成因给出了一些新的见解。在此

基础上,我们对比了板块边缘地震和中国地震的特点,指出了中国地震与环太平洋周围的板块边缘地震存在明显差别。中国的地震和矿产资源分布与地壳应变后形成的通道有明显关联,针对中国的地质活动特点,作者提出了物质流的假说,该理论体系可以很好的解释我国地震的成因以及矿产资源的分布特征,为预防地震和开发利用矿产资源提供了新的思路。

G1-36

专题代号: G

形貌对 MAPbI₃ 纳米材料光电性能调控研究

张华芳、王涛、毛艳丽

河南大学物理与电子学院, 河南省开封市, 邮编: 475004

Email: zhf610@163.com

MAPbI₃ (MA = CH₃NH₃) 作为一种新型太阳能电池吸光材料,因其光电特性优异、制备过程简单、原料成本低廉等优良特性,已经被广泛应用到太阳能电池的研究中,但该材料的带隙较大且载流子寿命较短仍是制约其应用范围的巨大瓶颈。¹ 当材料的尺寸降低到纳米尺度时,形貌成为调控材料物理特性的重要参量之一,² 因此为了探索形貌对 MAPbI₃ 光电性能的影响,本研究中,我们通过热溶剂法制备了 MAPbI₃ 纳米棒、纳米块和纳米片,研究了形貌对其带隙和发光性能的影响,并探索了压力对其性能的进一步调控。研究发现 MAPbI₃ 纳米棒、纳米块和纳米片的带隙分别为 1.56 eV、1.58 eV 和 1.57 eV,寿命分别为 50 ns、71 ns 和 109 ns,展现出了显著的形貌依赖性。此外,纳米块和纳米片的荧光峰位和荧光强度在压力下展现出了不同的变化规律,其中,MAPbI₃ 纳米块在压力下出现了减小-增大-再减小的趋势,在 3.5GPa 获得的最小带隙为 1.411eV,明显小于前人报道的 MAPbI₃ 体材料的带隙值。³ 通过进行原位高压拉曼进一步测试,我们发现在 3.5GPa 有新的拉曼峰出现,表面这些变化主要与其结构在压力下的变化有关。该研究工作为减小 MAPbI₃ 纳米材料的带隙,增强其载流子寿命,提供了实验依据。

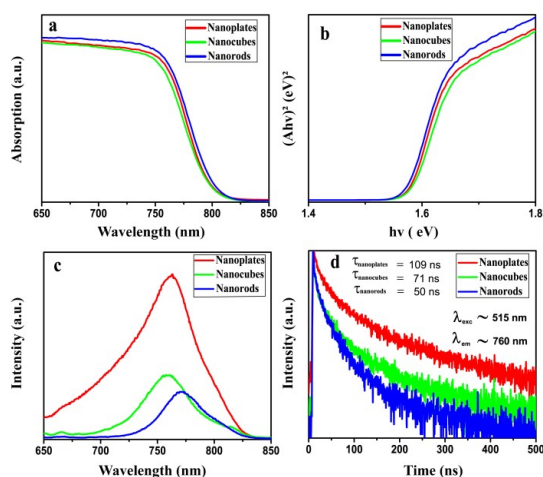


图 1 MAPbI₃ 纳米片/块/棒的(a)紫外吸收光谱, (b)带隙图, (c)光致发光谱, (d)荧光衰减曲线图。

关键词: MAPbI₃ 形貌 带隙 光电

[1] Kojima, A.; Teshima, K.; Shirai, Y.; Miyasaka, T., J. Am. Chem. Soc., 2009, 131, 6050-6051.

[2] Zhang, H.; Cheng, B.; Li, Q.; Liu, B.; Mao Y., J. Phys. Chem. C, 2018, 122,5188-5194.

[3] Konga, L.; Liu, G.; Gong, J., et al. Mao. PNAS, 2016,113, 8910-8915.

G1-38

专题代号: G

Structure and electronic states from one- to two-dimensional Mott insulator: Sr_{1-x}La_xCuO_{2+y} systems

仲勇, 汪瑞峰, 张学锋, 朱玉莹, 窦子媛, 王旻, 张定, 朱静, 宋灿

立, 马旭村, 薛其坤

清华大学物理系, 北京 10084

Email: wrf17@mails.tsinghua.edu.cn

Abstract: Understanding the doping of Mott insulator is the key to uncover the mechanism of

cuprate high-temperature superconductors (HTSC). Orthorhombic SrCuO₂ (O-SCO) is a prototype of one-dimensional Hubbard model and Tomonaga-Luttinger liquid, and its metastable phase tetragonal SrCuO₂ (T-SCO) is a parent compound of HTSC. Here, we report on the growth and atomic-scale characterization of O-SCO films and T-SCO films by molecular beam epitaxy, scanning tunneling microscopy/spectroscopy and scanning transmission electron microscopy. For O-SCO films, two types of terminated surfaces of striped Cu-O and reconstructed Sr-O are identified. For T-SCO films, only CuO₂ terminated surfaces are found for further electronic measurement.

With the doping of La³⁺ in T-SCO films, we visualized the evolution of electronic structure of Sr_{1-x}La_xCuO_{2+y} films that cover the entire electron- and hole-doped regime. The direct investigation on the CuO₂ planes reveals that the doping does not change the fundamental Mott-Hubbard band structure, but leads to a systematic shift of the Fermi level. The Mott insulator-metal transition is accompanied with the low-lying electronic states, which exhibit a remarkable dichotomy between electron- and hole-doped cuprates. Our results display how the doping interacts with the ground state of HTSC at a wide range and provide experimental basis for developing microscopic theories for cuprate superconductivity.

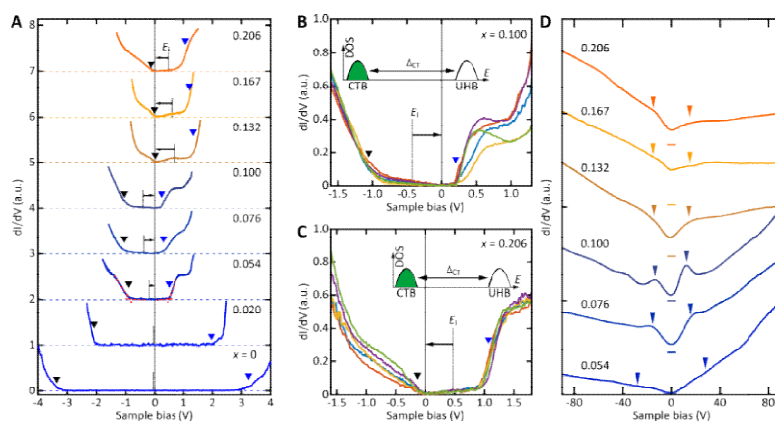


Figure 1. Electronic structure of Sr_{1-x}La_xCuO_{2+y}

Key words Cuprates Superconductivity Mott insulator STM

基金项目: 国家自然科学基金

G1-39

专题代号: G

基于金刚石氮空位的微米尺寸超导薄膜交流抗磁响应空间 成像

徐影¹、於逸俊¹、Yuen-Yung Hui²、苏雨聃¹、程军¹、Huan-Cheng Chang²,

张远波^{1, 3}、沈元壤^{1, 4}、田传山^{1, 3*}

¹ 复旦大学物理学系, 上海 200438

² 台北中央研究院

³ 人工微结构科学与技术协同创新中心, 南京 210093

⁴ Department of Physics, University of California, Berkeley, California 94720, United States

*Email: cstian@fudan.edu.cn

摘要: 二维超导体近年来因其中蕴含的新物理, 灵活的结构可调自由度以及潜在的应用可能而备受关注。然而, 由于难以制备出均匀、高质量且大尺寸的薄膜样品, 目前对这类样品磁响应的研究往往受到很多限制。我们在这项工作中发展了一套新方法, 即利用金刚石中氮空位作为局域的微波磁场探针, 实现对微米尺寸超导薄膜周围微波磁场分布进行成像。我们在 $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ (超导转变温度 91K) 薄膜上验证了该方法, 并分别在厚度为 33nm 和 125nm (接近体块材料) 的样品中看到了交流麦斯纳效应, 其出现的温度分别为 78K 和 91K。经分析, 在厚度为 33nm 的薄膜中看到的这一反常交流磁响应可能是由热激发的磁通量子/反磁通量子的扩散运动造成的。我们的交流磁探测方法具有接近光学衍射极限的空间分辨率和 $14 \text{ T/Hz}^{1/2}$ 的噪声水平。这项技术可以通过进一步发展提高磁场探测灵敏度和改进测量方法, 实现对单层超导薄膜的测量, 并得到局域的交流磁导率或电导率。同时, 这项技术也有望应用到其他尺寸受限的新奇二维材料的磁响应探测中。

关键词: 二维超导, 交流磁响应, 麦斯纳效应, 光探测磁共振

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO.11874123) 等

低维硼化铜的发现

翁晓基、岳城光、周向锋*

南开大学物理科学学院, 天津 300071

燕山大学亚稳材料制备技术与科学国家重点实验室, 秦皇岛 066004

Email: 1120160044@mail.nankai.edu.cn

摘要: 金属硼化物因具有超导、超硬、高熔点、化学惰性和量子拓扑等独特性质而备受关注。检索无机晶体结构数据库 (ICSD) 可获得 1200 余种二元硼化物, 但具有可靠化学计量比的 IB 和 IIB 族硼化物并不存在, 这源于硼和这些金属具有相近的电负性和差别较大的原子半径, 导致电荷转移困难而倾向于以固溶体或掺杂的形式存在。极端条件(高压或低维等)是合成新化合物的有效途径之一, 由于表面原子极其活泼, IB 和 IIB 族金属表面在合适的条件下有望生长新颖硼化物。

课题组团队采用分子束外延的方法在超高真空 Cu(111)表面沉积单质硼, 由于表面铜原子与硼反应从而形成锯齿状的二维硼化铜。利用扫描隧道显微镜结合第一性原理计算解析了其复杂的晶体结构, 并初步探讨了形成机理。计算表明这是一种新亚稳材料, 具有不寻常的导电性质, 在机械和电子器件等领域具有重要潜在应用, 二维硼化铜的发现表明在体相中不存在的化合物可以在表面得到, 拓展了低维材料研究的方向。

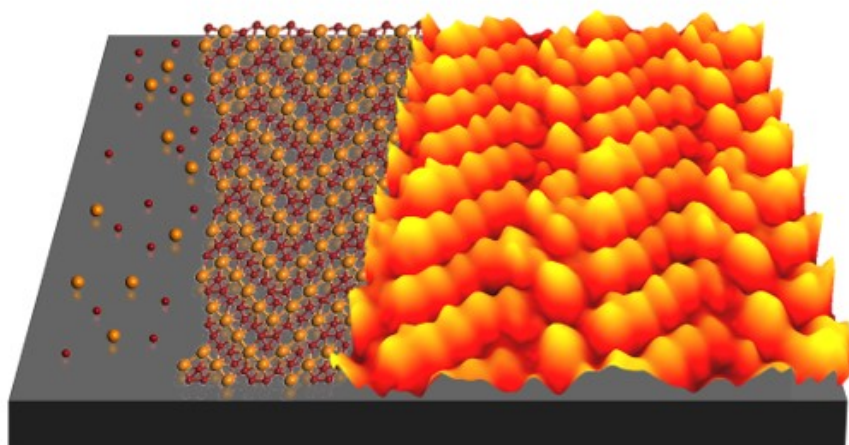


图 1 Cu(111)表面沉积硼，获得二维铜化硼

关键词：二维硼化铜 分子束外延 扫描隧道显微镜 第一性原理

参考文献

- 【1】 Van Der Geest, A. G. & Kolmogorov, A. N. Stability of 41 metal–boron systems at 0 GPa and 30 GPa from first principles. *Calphad*, 2014, 46, 184.
- 【2】 Wu, R. et al. Large-area single-crystal sheets of borophene on Cu(111) surfaces. *Nat. Nanotech.* 2019, 14, 44.

基金项目：国家自然科学基金项目(NO. 11674176, 11874224)

G2-02

专题代号： G 双曲材料表面的奇异反射和折射性质

Anomalous reflection and transmission at the surface of Hyperbolic materials

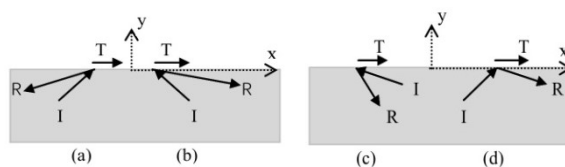
王选章，付淑芳

(光电带隙材料教育部重点实验室，哈尔滨师范大学)

双曲材料是一类新的电磁材料，许多奇异的电磁和光学现象相继被发现。当前有两类双曲材料，一类是人工结构材料（即双曲超材料，hyperbolic metamaterials）；另一类是天然双曲晶体（其代表性的是 hexagonal boron nitride）。双曲材料具有大的各向异性，反符号的介电张量主值。天然双曲材料的光学损失很低且存在多个分立的双曲频带。我们研究了天然双曲晶体表面光学反射和折射（或透射）。我们让晶体的光轴与表面有一个任意夹角，偏振光分两种情况入射到表面上。（1）光从空气中入射[1]；（2）光从晶体内入射到内表面上[2]。

在（1）的情况下我们发现一些有趣的现象：i. 当入射角增加时，反射系数反而下降。ii. 由于各向异性的存在，晶体中有两个折射波（the o-wave and e-wave）。对于 e-波而言，在每一个双曲频带中存在一个特殊频率点（SP），它依靠光轴的取向。在这点的两侧，e-波和反射波展示完全不同性质。iii. e-波的能量严重偏离入射面；在 SP 点上能流有一个很大的峰值；在这个点的两侧能流的方向相反，这意味着一种开关效应。

在 (2) 的情况下我们发现另外一些异常的现象: i. 反射不遵守反射定律, 即反射角不等于入射角; ii. 存在负反射现象, 即反射波和入射波在表面法线的同一侧; iii. 在一个双曲频区, 反射光线可以比入射光线强很多, 有时透射光也比入射光强。如下图 (示意图) 所示:



此外在这样的表面上还存在着幽灵表面极化子波[3].

[1] Sheng Zhou, Abdullah Khan, Shu-Fang Fu and Xuan-Zhang Wang, *Optics Express* **27**, 15222 (2019).

[2] Xuan-Zhang Wang, et al., to be published.

[3] Sheng Zhou, Shu-Fang Fu, Qiang Zhang and Xuan-Zhang Wang, *J. Opt. Soc. Am. B* **35**(11), 2764-2769 (2018).

G2-03

专题代号: G

层状准一维超导体 Ta_2PdS_5 中的量子格里菲斯奇异性证据

张恩泽, 徐洪起, 康宁, 毛志强, 修发贤*

复旦大学物理学系, 表面物理国家重点实验室, 上海 200438

Email: Faxian@fudan.edu.cn

摘要: 格里菲斯奇异性最早由美国物理学家格里菲斯 (Griffiths) 在 1969 年提出, 指的是在相变中标度不变性被打破, 临界指数呈发散趋势而不再保持为常数的行为。而量子格里菲斯奇异性则是指系统在零温下发生的量子相变中具有格里菲斯奇异性。理论上, 格里菲斯奇异性并未指定只发生在某一特定维度。从理论提出至今的几十年来, 实验科学家只在少数三维铁磁体系和二维超导体体系如镓薄膜中观察到了相变中的临界指数发散现象, 而格里菲斯奇异性是否存在于更低维度的体系中还一直未有实验证实。

为了寻找更低维体系中的量子格里菲斯奇异性, 课题组研究了新型准一维超导体 Ta_2PdS_5 。基于 Ta_2PdS_5 纳米线中的准一维超导, 课题组研究了 Ta_2PdS_5 纳米线在极低温下的超导-金属量子相变【1】。研究发现在超导-金属量子相变临界点附近其相邻温度等温磁阻曲线的交点在相图上是一条连续的线而并非如一般超导-金属相变那样交于同一临界点, 交点

处的磁场随着温度改变而变化而并非是一个值；通过进一步对样品磁阻的有限尺寸标度分析发现，在接近量子相变临界点时，体系中的动力学临界指数在逼近绝对零度或临界磁场时并非为一常数而是表现出发散的行为。这些特性都是量子格里菲斯奇异性的直接有力证据。该项研究成果首次将量子格里菲斯奇异性扩展到了准一维超导体中，对于深入理解量子相变临界点附近的无序涨落和准一维超导具有重要意义。

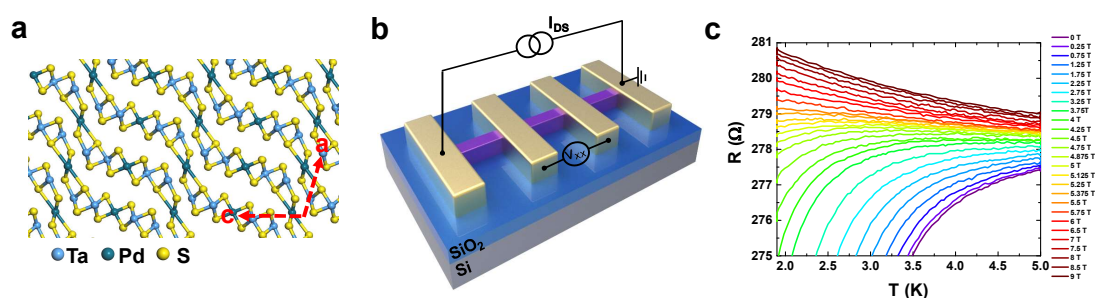


图 1(a)Ta₂PdS₅ 晶体结构图，(b)Ta₂PdS₅ 纳米线器件结构示意图，(c)Ta₂PdS₅ 纳米线中的超导-金属转变。

关键词：纳米线，准一维超导，量子格里菲斯奇异性，超导-金属相变，临界指数。

【1】 Zhang, E., et al. (2018). "Signature of quantum Griffiths singularity state in a layered quasi-one-dimensional superconductor" Nat Commun. 9(1): 4656.

基金项目：国家自然科学基金（11474058, 11874116, 61674040；博士后创新人才支持计划 (BX20190085)）

G2-04

专题代号： G

利用衬底调控实现二维半导体超窄平面 pn 结及量子点

潘毅^{1,2}, Stefan Fölsch²

1. 西安交通大学材料学院自旋电子材料与量子器件研究中心，西安 710049

2. Paul-Drude-Institut für Festkörperelektronik, Hausvogteiplatz 5-7, 10117

Berlin, Germany

Email: yi.pan@xjtu.edu.cn

摘要 :二维半导体材料未来在微电子器件中应用的一个重要条件是实现与传统半导体工艺线宽同等尺度(纳米级) 的平面pn结等基本结构单元。然而, 当前通过调控生长参数拼接两种材料所制备的平面pn结其内建电场区域宽度仍然受限于材料质量和掺杂浓度等因素难以达到纳米级。我们研究发现通过图案化调控衬底局域功函数的方法, 利用表面二维半导体与衬底间vdW界面上遵循Schottky Mott rule的特点, 可以实现纳米级宽度二维半导体平面pn结, 并可诱导产生结构连续但局域电子结构受限的量子点。

以二维半导体WSe₂为例, 我们通过对衬底(含外延石墨烯的SiC(0001)) 进行部分氢插层处理, 得到了含有两种不同功函数区域的图案化衬底, 并使用MOCVD在这种衬底上制备了WSe₂。低温扫描隧道显微镜对这种WSe₂样品的能带结构测量显示在两种不同功函数衬底上的WSe₂的能带有显著偏置(offset ~0.25 eV), 在衬底两种区域的交界处之上的单层WSe₂薄膜内实现了纳米级的超窄平面pn结, 如图1(a) 50条dI/dV谱组成的能带结构图所示, 其pn结宽度小于10nm。图1 (b) 是材料与衬底的剖面结构示意图, 图1 (c) 的能带结构示意图展示了pn结形成机理。此外我还发现在面内纳米尺度的p型或n型区域内部, 由于导带或价带带边电子态在一定能量区域内由于空间受限形成量子点, 例如图1 (d) 展示的价带边电子态(VB) 在量子点内部形成受限电子态。我们预期这种方法上可以推广到多种二维半导体材料, 用于超窄面内同质结或异质结构造。

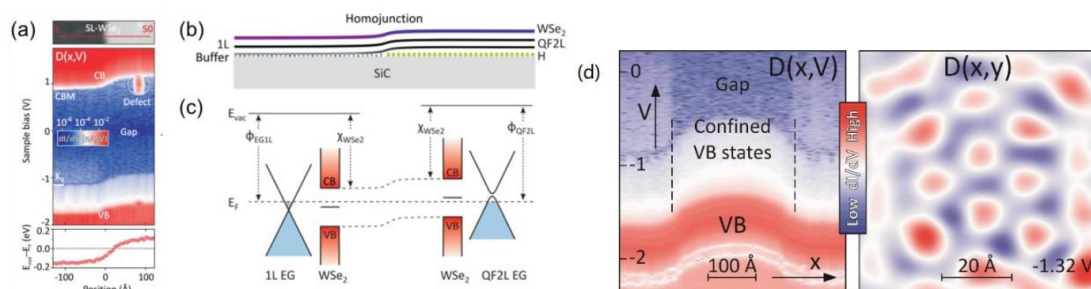


图1. 利用图案化衬底实现的单层WSe₂平面pn结及量子点

关键词：二维半导体，平面pn结，量子点，扫描隧道显微镜

[1] Yi Pan, Stefan Fölsch, Yifan Nie et al. Nano. Lett. 18, 1849-55, 2018.

[2] Yi Pan, Stefan Fölsch, Yu-Chuan Lin et al. 2D Mater. 6, 021001, 2019.

基金项目：国家自然科学基金项目 (NO. 11704303)

G2-05

专题代号： G

Electronic Phase Separation Phenomena in Manganite Ultrathin Films

Hongyan Chen¹, Yang Yu¹, Zhe Wang¹, Yu Bai¹, Hanxuan Lin¹, Xiaolong Li², Hao Liu¹, Tian Miao¹, Yunfang Kou¹, Yongsheng Zhang³, Yan Li³, Jin Tang³, Zechao Wang⁴, Peng Cai¹, Yinyan Zhu¹, Zhaohua Cheng³, Xiaoyan Zhong⁴, Wenbin Wang¹, Xingyu Gao², Lifeng Yin^{1,*}, Ruqian Wu^{1*}, Jian Shen^{1,*}

1. Fudan University, Shanghai 200433, China.

2. Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201204, China.

3. Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China.

4. Tsinghua University, Beijing 100084, China.

Email: hongyanchen13@fudan.edu.cn

Ultrathin films often exhibit two-dimensional characteristics that are distinctly different from their

bulk counterpart. In this work, we show thickness dependent inhomogeneous antiferromagnetic (AFM) to ferromagnetic (FM) phase transition in $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ (LSMO) ultrathin films grown on SrTiO_3 (001) (STO) substrate. Combining scanning tunneling microscopy and magneto-optical Kerr effect measurements, we have obtained the evolution of the magnetic state of the LSMO ultrathin films as a function of thickness. Strikingly, the LSMO ultrathin films are electronically phase separated in both lateral and vertical directions in thickness range between 4 and 7 unit cells. Specifically, the films are formed by 3 unit cell thick antiferromagnetic base layers, on top of which the layers consist of FM metallic nanodisks in AFM matrix. Our first principles calculations unravel the rather counterintuitive physical origin of this mixed phase state; the formation of FM/AFM domain boundaries is energetically favorable. At 8 unit cells, an abrupt shear strain relief occurs by forming twinning patterns along [010] and [100] directions. After the shear strain is relieved, the whole films transform into a uniform FM metallic state. Our observation reveals the richness of electronic and magnetic phases for strongly correlated systems even in their two-dimensional limit.

基金项目:

- 1 1. The National Key Research and Development Program of China (2016YFA0300701, 2016YFA0300702, and 2015CB921400).
- 2 2. Shanghai Municipal Natural Science Foundation (18JC1411400, 18ZR1403200).
- 3 3. The Program of Shanghai Academic Research Leader (18XD1400600, 17XD1400400).
- 4 4. The National Key Research and Development Program (2016YFB0700402)

G2-06

专题代号: G

Realizing valley polarization and valley inversion in graphene by using a valley magnet

何林

北京师范大学

在纳米尺度甚至原子尺度的精度内实现对材料谷赝自旋的操控是凝聚态物理和材料物理的前沿研究热点，在未来谷电子学器件中有巨大的应用前景。在本报告中，我将系统介绍石墨烯中谷赝自旋的极化和翻转研究，并讲解如何实现纳米尺度甚至原子尺度的高精度操控。我们结合外磁场和应变产生的赝磁场获得谷磁体 (valley magnet), 在石墨烯中实现谷极化和谷翻转，并在单电子精度内实现对谷极化和谷翻转的测量。

G2-07

专题代号: G

扫描近场光学显微技术研究 六方氮化硼中的声子极化激元及局域应变

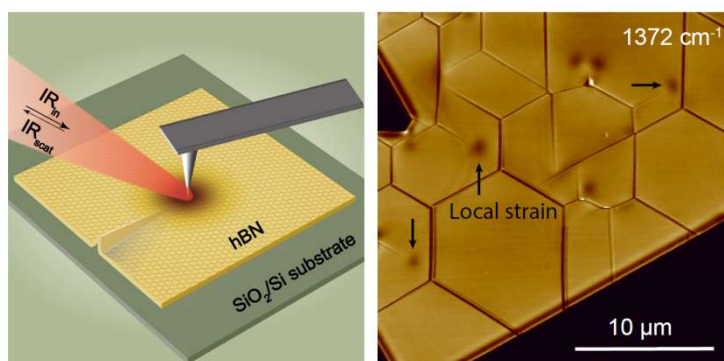
史志文

上海交通大学物理与天文学院, 上海 200240

Email: zwshi@sjtu.edu.cn

摘要:

扫描近场光学显微镜可以突破光学衍射极限, 研究纳米尺度上材料的光学性质。该报告将介绍运用该超分辨光学显微技术研究二维材料六方氮化硼中声子极化激元的激发、探测, 并介绍一种声子极化激元辅助的纳米尺度材料应变分布的高灵敏探测新方法。



图一: 运用扫描近场光学显微技术研究六方氮化硼中的声子极化激元及局域应变

关键词：扫描近场光学显微技术、六方氮化硼、声子极化激元、局域应变探测

参考文献：

- 【1】 Bosai Lyu et al., Phonon Polariton-assisted Infrared Nanoimaging of Local Strain in Hexagonal Boron Nitride, *Nano Lett.* 19(3), 1982-1989(2019).
- 【2】 Zhiwen Shi et al., Amplitude- and phase-resolved nanospectral imaging of phonon polaritons in hexagonal boron nitride. *ACS Photonics*, 2(7), 790-796 (2015).

G2-08

专题代号： G

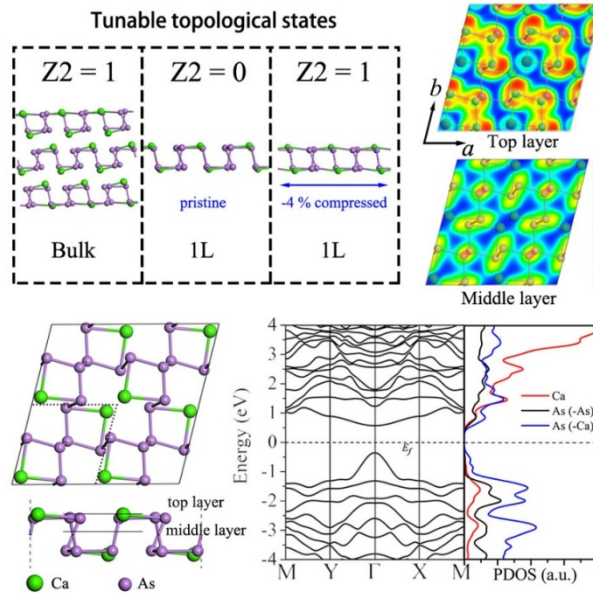
单层三砷化钙：非平庸—平庸拓扑态转变的二维半导体

李峰、武红、孟召顺、陆瑞锋*、普勇*

南京邮电大学理学院，南京 210023

Email: lifeng@njupt.edu.cn

摘要：拓扑绝缘体允许非背向散射的超低电阻电子器件的输运，它对于基础物理的理解以及基于新原理的电子通信的应用具有极其重要的意义。本文中首次提出利用单层材料的强表面弛豫效应和外加应力的“钳夹”效应，从而获得拓扑态可调的拓扑半导体材料：单层三砷化钙薄膜材料。本文采用第一性原理计算方法，在三砷化钙薄膜材料中证实了该机制开关拓扑态的可行性。研究发现，体相三砷化钙体是典型拓扑材料，当将其剥离至少层，其拓扑上的非平凡态转变为平凡态，这一机制的提出拓展了对调控材料拓扑性质的认识；相反的，当对单层三砷化钙施加双轴 4.5 %压缩应变，其平凡拓扑态则会恢复成原先的非平凡拓扑态，从而实现拓扑性质的双向调控。研究表明，单层三砷化钙作为一种新型二维半导体具有一系列令人鼓舞的功能，如直接带隙（0.92 eV）半导体、高空穴迁移率、半导体—金属转变现象、可见光吸收效率与晶体硅相当。这一系列的发现将推动单层三砷化钙作为一种新型拓扑材料的理论和实验研究的进展。期待在不久的将来，基于这一研究的拓扑态可调的三砷化钙半导体材料能够被实验证实，这对于我国在半导体电子器件领域的国际竞争中具有重要的意义。



图：单层三砷化钙半导体的几何、电子结构

关键词： 二维材料，拓扑非平庸电子态， 第一性原理计算， 量子效应

资助项目： 国家自然科学基金(No. 61704083, 61605087 and 61874060), 江苏省自然科学基金(No. BK20160881 and BK20181388).

参考文献

- [1] Moore, J. E. The birth of topological insulators. *Nature* **2010**, 464 (7286), 194-198.
- [2] Xia, Y.; Qian, D.; Hsieh, D.; Wray, L.; Pal, A.; Lin, H.; Bansil, A.; Grauer, D.; Hor, Y. S.; Cava, R. J.; Hasan, M. Z. Observation of a large-gap topological-insulator class with a single Dirac cone on the surface. *Nat. Phys.* **2009**, 5 (6), 398-402.
- [3] Li, Y.; Sun, Y.; Zhu, W. W.; Guo, Z. W.; Jiang, J.; Kariyado, T.; Chen, H.; Hu, X. Topological LC-circuits based on microstrips and observation of electromagnetic modes with orbital angular momentum. *Nat. Commun.* **2018**, 9, 4598.

G2-09

专题代号： G

Chiral phonons in kagome lattices

陈浩^{1,2}、吴维康²、杨声远²、李晓¹、张力发^{1,*}

¹ 南京师范大学-苏立科技热能研究中心(NSTER)&量子输运与热能科学中心
(CQTES),

物理科学与技术学院, 南京师范大学, 南京 210023

² 量子材料理论室, 新加坡科技与设计大学, 新加坡, 487372

Email: phych@foxmail.com

摘要: Chiral phonons have been theoretically proposed [PRL 115, 115502 (2015)] and experimentally verified [Science 359, 579 (2018)] in materials with hexagonal lattice. Here, we theoretically predict and investigate the chiral phonons in the kagome lattice. We show that with broken inversion symmetry, chiral phonons with large circular polarization can emerge at the K and K' high symmetry points. Different from the hexagonal lattice, these chiral phonons have all three sublattices vibrating with the same chirality, and the vibration orbit can take an elliptical shape. They possess valley-contrasting Berry curvatures sharply peaked at the K and K' valleys, which can be used to separate the chiral phonons according to their valley label via the valley phonon Hall effect. The pseudo-angular momentum for these chiral phonons have also been studied, which determines the selection rules of electron-phonon interaction in the intervalley scattering process. Furthermore, we show that by tuning the relative bond strength, there can be a change in phonon chirality associated with a phonon branch switching. Our work enriches the studies on chiral phonons, and offers a new probe for many fascinating quantum materials which possess the kagome type lattice.

关键词: kagome, chiral phonons, pseudo-angular momentum

参考文献:

- 【1】 Zhang L, Niu Q. Chiral phonons at high-symmetry points in monolayer hexagonal lattices[J]. **Phys. Rev. Lett.**, 2015, 115(11): 115502.
- 【2】 Zhu H, Yi J, Li M Y, et al. Observation of chiral phonons[J]. **Science**, 2018, 359(6375): 579-582.

G2-11

专题代号： G

原子级精确的石墨烯纳米结构的制备与电磁性能表征

王世勇*

上海交通大学物理与天文学院，上海 200240

*通信作者：Tel: (+86) 13918448667; E-mail: shiyong.wang@sjtu.edu.cn

石墨烯纳米结构具有优良的电磁性质，在材料科学、物理学、化学及电子学方向有很大的潜在研究价值。现阶段，制备石墨烯纳米结构大多通过‘自上而下’的方法。但这些方法面临一个共同的难题，即无法精确控制纳米结构的形状和边缘结构。瑞士联邦实验室Roman Fasel研究组及其合作者，在2010年成功利用表面化学合成方法解决了这个难点。基于“自下而上”表面合成途径，他们首次成功制备了具有原子级精确结构的超窄石墨烯纳米带 [1]。本次报告主要介绍近几年我们在石墨烯纳米结构方面的一些工作进展。通过设计不同的分子前驱物，利用表面化学合成方法可以精确调控石墨烯纳米结构的宽度、形状以及掺杂 [2-6]。利用扫描隧道显微镜技术，原子力显微镜技术等表面探测手段，在原子尺度下表征了各种纳米带的原子结构与电磁性质。相关工作在材料生长方面，验证了表面化学合成方法是一种非常有效的生长方法，可以用来生长各种原子级精确的纳米带；在材料表征方面，确定了石墨烯纳米带的电磁性质，进而为利用石墨烯纳米带制备高性能的电子器件打下了很好的前期基础。

参考文献：

- [1] J. Cai et al., Atomically precise bottom-up fabrication of graphene nanoribbons, *Nature* 466, 470, 2010.
- [2] P. Ruffieux*, S. Wang* et al., On-surface synthesis of graphene nanoribbons with zigzag edge topology, *Nature* 531, 489, 2016.
- [3] S. Wang et al., Giant edge state splitting at atomically precise graphene zigzag edges, *Nature comm.*, 11507, 2016.
- [4] O. Groning*, S. Wang* et al., Engineering of robust topological quantum phases in graphene nanoribbons, *Nature* 560, 175, 2018.
- [5] S. Wang et al., On-surface synthesis and characterization of individual polyacetylene chains, *Nature Chemistry*, Accepted
- [6] Y. Zheng et al., Engineering of magnetic coupling in nonbipartite nanographenes, Submitted

G2-12

专题代号： G

金属-TiO₂ 界面的电子结构表征：从金属团簇到金属单原子

谭世惊

中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心，合肥 230026

Email: tansj@ustc.edu.cn

摘要：把金属负载到二氧化钛（TiO₂）表面，可以极大的提高 TiO₂ 的催化与光催化活性，这主要得益于异质界面的电荷分离，提高光生载流子的寿命。在纳米团簇尺度，金属-TiO₂ 界面可以提供高活性的化学反应位点。同时，金属团簇的等离激元共振可以使光生载流子的产率提高~2 个量级。当金属分散度达到单原子尺度时，能最大限度地提高金属原子的利用率，并引入单原子催化的优异性能，如表面自由能增大、不饱和配位环境、量子尺寸效应等。从微观尺度上表征金属-TiO₂ 界面的结构、电子态、电荷转移对认识单原子催化与 TiO₂ 光催化的协同效应具有重要的意义。我们利用扫描隧道显微镜和光电子能谱技术表征了 Au、Ag、Pt 等贵金属在金红石 TiO₂(110)表面的结构和电子态。实验发现金属诱导能隙态（Metal-induced gap states, MIGS）广泛存在于异质界面，并成为热电子激发的主要来源。在原子尺度下，实验揭示了 Au 单原子在表面氧空位缺陷及 Ti⁴⁺位点的选择性吸附，发现在 Ti⁴⁺上负载的 Au 原子具有原子级局域的 MIGS。实验进一步证实 MIGS 可以提供光生空穴从 TiO₂ 衬底转移到 Au 原子的有效通道，从而活化 Ti-Au 键，并促发 Au 单原子在表面的扩散。在本报告中，我将重点介绍 MIGS 在金属-半导体界面的起源及其重要性，并阐述 MIGS 在金属单原子催化与 TiO₂ 光催化协同效应中的潜在作用。

关键词：金属-半导体界面 单原子催化 光催化 能隙态

G2-13

专题代号： G

三角形金纳米片的局域光子态密度探测

曹水艳¹、阚彩侠¹、姜明明¹、Gerald Dujardin²

1. 南京航空航天大学理学院, 南京 211100

2. Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, CNRS, University of Paris-Sud,
France 91400

Email: shuiyancao@nuaa.edu.cn

摘要: 扫描隧道显微镜 (STM) 的出现使人类第一次能够实时地观测单个原子在物质表面的排列状态。作为一种用于探测材料表面电子行为的成熟技术, 它在研究涉及局域电子态密度 (local electronic density of states) 的表面科学、材料科学、生命科学等领域取得了重要进展。相形之下, 采用 STM 来探测局域光子态密度 (local optical density of states) 的相关研究到目前为止还未见报道。局域光子态密度可以反应局部区域光学模式的“容量”, 更为重要的是通过适当地操控能够大幅度提高激发元 (emitter) 的自发辐射效率, 从而为纳米光子学, 光伏, 光化学, 量子光学等领域提供新的启示。本文创新地设计自然环境下 STM 探头和反转倒置显微镜相结合的装置, 实现了一种三角形纳米金片的局域光子态密度的探测。

本文所采用的样品是通过“种子法”制备了尺寸在 600-900 nm 间的三角形金纳米薄片, 其扫描电镜和单个纳米片的 STM 形貌分别如图 1(a)和(b)所示。基于 STM 的非弹性隧穿电流激发金纳米片的局域表面等离子体光学模式, 辐射衰减能量以光的形式透过透明基底 (ITO), 最终被单光子计数器探测, 形成光子映射图 (photon mapping)。通过选择不同波段的窄波段滤波片以筛选不同能量的隧穿电子, 从而激发金纳米薄片的不同光学模式, 包括边缘模式 (edge modes) 和中心模式 (central modes)。此外, 后续基于电子能量损失谱 (EELS) 局域光子态分布探测研究和 COMSOL 理论计算结果 (如图 1(c)所示) 进一步佐证了 STM 可以作为一种新技术用以探测局域光子态密度, 为 STM 在光学领域的应用提供了更多的可能性。

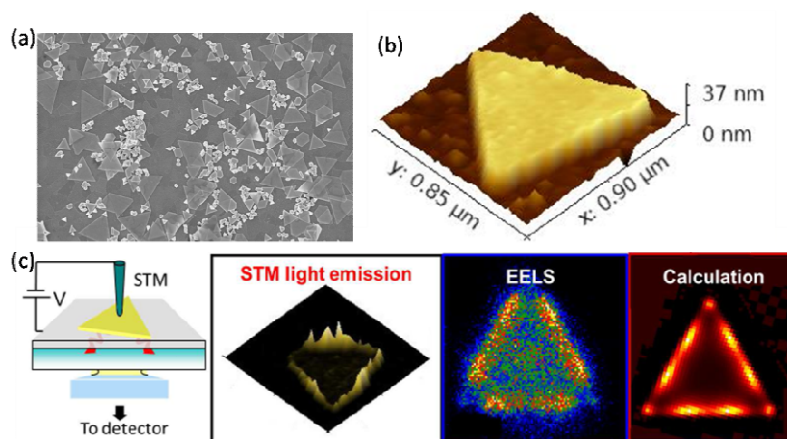


图 1. (a) 三角形金纳米片的电镜图；(b) 单个金纳米片的 STM 图片；(c) 基于 STM, EELS 和理论计算的结果对比图。

关键词： 扫描隧道显微镜，局域光子态密度，金纳米片

G2-14

专题代号： G

六角磷化硼层状材料的紧束缚模型和第一性原理研究

王影、徐金荣等

安徽建筑大学数理学院，合肥 230601

Email: jrxu123@163.com

摘要： 二维层状材料六角磷化硼 (h-BP) 具有较高的载流子迁移率和合适的能隙，因此被认为是电子学和光电子学中潜在的应用材料。本文详细推导了单层和双层两种堆积形式 (AB_B-P 和 AB_B-B) 的紧束缚模型。考虑至平面内第五近邻跃迁和层间第二近邻跃迁，得到的紧束缚模型能带结构很好地重复基于杂化泛函的第一性原理计算结果。K 点附近的低能有效近似能带结构显示当 h-BP 从单层变成双层时，价态处的费米面经历赝-Lifshitz 转变，这种转变归结于层间的两种跃迁方式而不是像双层石墨烯中一种层间跃迁。不仅如此，我们还通过第一性原理计算了在应力和电场条件下单层和双层 h-BP 的电子行为。研究发现单层 h-BP 的能隙和载流子有效质量随着应力的增强而逐渐增大。对于 AB_B-P 和 AB_B-B 堆积形式的双层 h-BP，能隙随应力或者电场表现出完全不一样的行为：AB_B-P 形式的 h-BP 其能隙随着应力或者是电场的增强而逐渐增大，而 AB_B-B 形式的 h-BP 其能隙是先减小至

零后再增大。我们采用上述的紧束缚模型很好地解释了电场或应力下能隙变化规律表现出奇异现象的物理机制。h-BP 电子行为的有效操控对于促进 h-BP 在现代电子学及光电子学中的应用具有重要的理论意义。

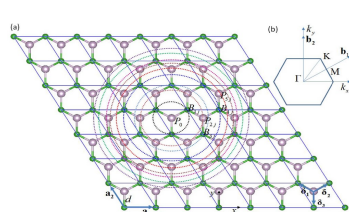


图1 单层 h-BP 的结构图和布里渊区

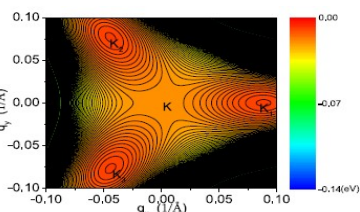


图2 AB-BP 双层结构几种计算能带对比

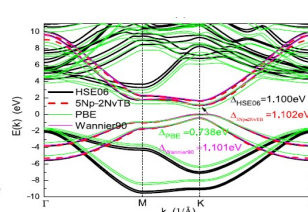
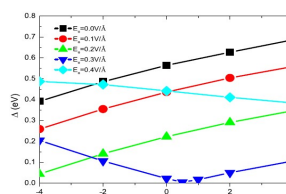
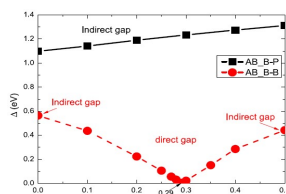
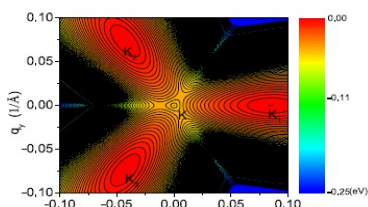


图3 AB-BP 双层结构费米面



关键词：六角磷化硼 紧束缚模型 第一性原理 电子行为

参考文献

【1】 Y. Wang et al., Tight-binding model for electronic structure of hexagonal boron phosphide monolayer and bilayer, *J. Phys.: Condens. Matter* 2019,31: 285501.

【2】 Y. Wang et al., Stress- and electric-field-induced band gap tuning in hexagonal boron phosphide layers, *J. Phys.: Condens. Matter* 2019, <https://doi.org/10.1088/1361-648X/ab36e5>.

基金项目：国家自然科学基金项目（NO. 11747016），安徽省自然科学基金面上项目（NO. 1808085MA19）

G2-15

专题代号： G

从二维平面单质体系到二维褶皱单质体系

陆赞豪

浙江大学物理系

Email: luyh@zju.edu.cn

摘要：自从石墨烯发现以来，大量研究集中于这类六方蜂窝状结构的拓扑电子态，随着实验上二维黑磷结构的制备成功，人们又转而研究这类具有褶皱的新型二维单质材料，但对这类结构是否存在类似的拓扑电子结构并不十分清楚。通过第一性原理计算和紧束缚模型，我们建立了和六方石墨烯结构狄拉克电子态之间的关系，理解了这类褶皱结构和石墨烯体系之间的相似性和差异性，证明黑磷结构的褶皱铋烯具有量子自旋霍尔效应，其产生拓扑电子态的物理机制是其特殊晶体结构对应的晶体场效应，实验测量到的拓扑边缘态和理论预测特性相符合，并证明褶皱铋烯拓扑态和其褶皱程度间的关系，为拓扑性质的可逆调控指出了可行方向。同时，由于褶皱破坏了中心反演，这类体系可从拓扑材料变成二维单质铁电材料。而铁电材料，特别是二维材料中的铁电性，由于其在信息存储和电学控制领域的巨大应用前景，在最近几年引起了人们的浓厚兴趣。另一方面，几乎所有报道的铁电材料都是由不同种类的原子组成的化合物。据我们所知，单元素材料的铁电性从未在文献中报道过。在这里，虽然很违反常识，但我们基于第一性原理计算，揭示了一系列单质二维体系及表面体系中的自发极化和本征铁电性及反铁电性。这些单元素材料的铁电居里温度可能高于室温，因此它们有望实现具有广泛应用前景的超薄铁电器件。于此同时，我们也构建一个通用模型来理解和搜索中新型二维铁电和反铁电材料。进一步，我们发现在某些单质体系中还有可能存在多铁性，具有巨大的潜在应用价值。

关键词：量子自旋霍尔，铁电，单质，二维材料

参考文献：

- 【1】 Lu, YH*; Xu Wentao et al, Topological Properties Determined by Atomic Buckling in Self- Assembled Ultrathin Bi(110), Nano Letters 2015, 15, 80-87
- 【2】 Lu, YH*; Zhou Di et al, Multiple unpinned Dirac points in group-Va single-layers withphosphorene”, npj Computational Materials 2016, 2, 16011
- 【3】 Xiao, CC; Wang, F; Yang, SYA; Lu, YH* et al, Elemental Ferroelectricity and Antiferroelectricity in Group-V Monolayer, Adv. Func. Mater. 2018, 28, 1707383

【4】 Wang, Y; Xiao CC; Lu, YH* et al, Two-dimensional ferroelectricity and switchable spintexture in ultra-thin elemental Te Multilayer, *Materials Horizons*, 2018, 5, 521

【5】 Xiao, CC; Wang, XW; Pi, XD; Yang, SYA; Feng, YP; Lu, YH*; Zhang, SB; Spontaneous symmetry lowering of Si (001) towards two-dimensional ferro/antiferroelectric behavior, *Physical Review Materials*, 2019, 3, 044410

G2-16

专题代号: G

Two-dimensional Metal Phosphorus Network

徐虎

南方科技大学物理系

Combining molecular-beam epitaxy (MBE), in-situ low temperature scanning tunneling microscopy (STM), quantitative low-energy electron diffraction (LEED) and density-functional theory (DFT) calculations, we discover a two-dimensional metal-P-network (MPhoN) when phosphorous atoms are deposited on an Au(111) surface. The 2D structure is energetically favorable and shows excellent match with both STM measurements and quantitative LEED analysis. The new finding challenges previous reports that the (5×5) structure is a single layer blue phosphorus, called blue phosphorene (blueP). Instead, the MPhoN structure shares many characteristics with the well-known metal-organic-network (MON). Indeed, sp³ hybridization provides P abundant layered allotropes that form the backbone for a variety of MPhoNs by changing and tailoring the linker metal element. Our work provides insights to tailor low dimension architectures of inorganic networks that maintain good long range order and are stable in a wide temperature range.

G2-17

专题代号: G

利用双石墨烯量子点实现具有相对论性质的人造分子

符中秋¹,潘月婷¹,周娇娇²,马冬林^{1,3},张钰¹,乔佳斌¹,江华²,

刘海文¹, 何林¹

1 北京师范大学物理系, 北京, 100875

2 苏州大学物理学院, 苏州, 215006

3 首都师范大学物理系, 北京 100048

[E-mail:jianghuaphy@suda.edu.cn](mailto:jianghuaphy@suda.edu.cn), haiwen.liu@bnu.edu.cn, helin@bnu.edu.cn

摘要: 两个相互耦合的量子点可以叫做人造分子。人造分子不仅可以探索耦合量子的基本物理性质, 而且在实现量子器件方面也很重要。然而, 先前的研究仅限于具有非相对性费米子的人造分子。我们观察到, 当两个圆形石墨烯量子点彼此耦合时, 可以实现具有相对论性质的人造分子。使用扫描隧道显微镜 (STM) 和扫描隧道谱 (STS), 我们观察具有相对论性质的人造分子的成键态和反键态的形成。成键态和反键态的形成改变了石墨烯量子点中的无质量狄拉克费米子的分布。由于分子态的相对论性质, 我们的实验表明相对论人造分子中不同角动量态的简并度可以通过外部磁场进一步打开, 成键态和反键态都分裂成两个独立的态。

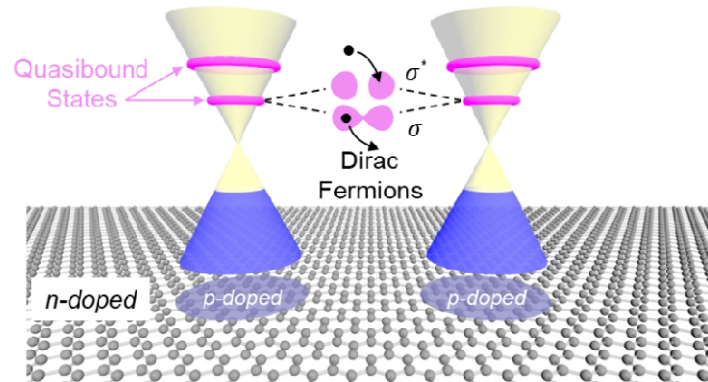


图 1 石墨烯量子点分子的示意图

关键词: 石墨烯、量子点、人造分子、狄拉克费米子、克莱因隧穿

参考文献

- [1] Zhongqiu Fuet al., Relativistic Artificial Molecules Realized by Two Coupled Graphene Quantum Dots. Preparing.

基金项目：国家自然科学基金（NO：11674029,11422430,11374035）；国家重点基础研究发展计划（NO：2014CB920903，2013CBA01603）；中国教育部新世纪优秀人才计划（NO：NCET-13-0054）等。

G2-18

专题代号： G

氢键在光激发 H₂O 解离中的重要作用探究

马晓川、史永亮、崔雪峰、赵瑾、谭世惊、王兵

中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心，安徽合肥 230026

Email: bwang@ustc.edu.cn

摘要：氢键是水化学中一类特殊的相互作用，极大地影响着固液界面的质子转移及电荷转移的动力学过程。通常，在超高真空环境下研究 H₂O 分子的解离过程，小于一个单层(< 1 ML) 的覆盖度使得分子间的氢键相互作用往往被忽略。然而，在真实的水环境下，其氢键相互作用是异常重要的。我们通过精确控制锐钛矿 TiO₂(001) 表面的 H₂O 覆盖度，清楚地揭示了从亚单层到多层的吸附过程中氢键网络的形成在 H₂O 解离中的关键性作用。通过利用光电子能谱（UPS 和 XPS）跟踪 H₂O 解离产生的带间态，实验发现在亚单层的 H₂O 覆盖度下，光激发 H₂O 解离可以忽略不计；但当覆盖超过一个单层(1ML)时，光激发水解离(H₂O+h⁺→H⁺+·OH) 可以瞬间被激活。进一步，通过设计光诱导及变温等可控实验，证实了高覆盖度下氢键网络的形成直接决定了 H₂O 解离的发生。结合密度泛函理论（DFT），阐明了氢键网络可以有效地降低 O-H 键断裂的能垒，同时辅助光激发载流子从 TiO₂ 转移到 H₂O 分子。这一结果揭示了锐钛矿 TiO₂(001) 表面的光活性需要氢键网络的协助，解决了对 TiO₂ 表面水解离过程和机理的长期争论，也为固液界面氢键网络的作用提供了新的见解。

关键词：固液界面 H₂O 解离氢键

G2-19

专题代号： G

氧空位有序的 LaCoO_x 薄膜的制备

安齐昌、孟梦、王珍珍、王亚德、张庆华、夏雨轩、谷林、杨芳、郭

建东

中国科学院物理研究所，北京 100190

Email: qichangan@iphy.ac.cn

摘要：复杂氧化物的氧空位有序相相对于它们的母体表现出独特的物理性质，这在多功能器件中有着很大的应用潜力。然而，由于热力学的不稳定性，氧空位有序的 LaCoO_x 薄膜很难制备。我们通过一种特殊的加热方式在生长得到的 LaCoO₃ 薄膜上诱导出一个从表面到 SrTiO₃ 衬底的温度梯度，从而制备出了大范围的单相的氧空位有序的 LaCoO_{2.67} 和 LaCoO_{2.5} 薄膜。并且研究了它们的宏观物理性质，包括，磁性，电输运性质以及光学性质。由于不同相之间的物理性质差异很大，这为通过调节氧空位的浓度和分布调控 LaCoO_x 薄膜的功能性提供了帮助。

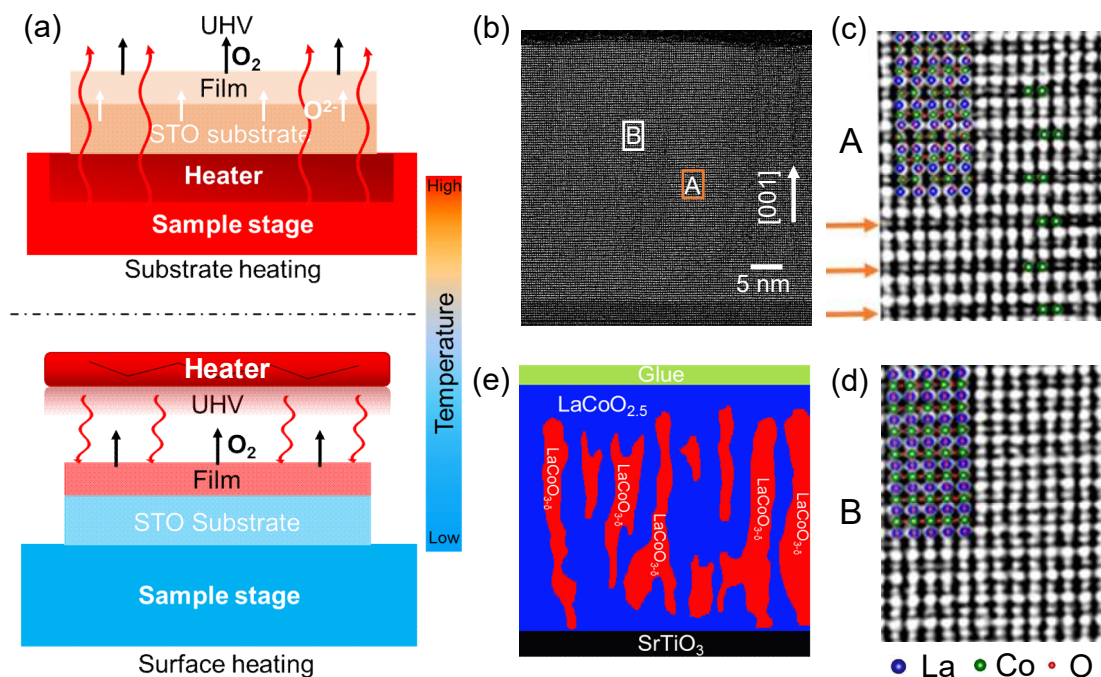


图 1 通过表面加热诱导氧空位有序相。

关键词：氧空位有序相 单相 LaCoO_x 温度梯度 氧离子迁移 宏观性质

参考文献

- 【1】 Moreo, Adriana, Seiji Yunoki, and Elbio Dagotto. "Phase separation scenario for manganese oxides and related materials." *Science* 1999, 283 (5410): 2034-2040
- 【2】 Kalinin, Sergei V., and Nicola A. Spaldin. "Functional ion defects in transition metal oxides." *Science* 2013 341 (6148): 858-859.

基金项目：国家自然科学基金项目（No. 11634016）等

G2-20

专题代号： G

调控石墨烯中单原子空位缺陷的磁性

张钰、何林

北京师范大学物理学系，北京 100875

Email: helin@bnu.edu.cn

理想的石墨烯是抗磁性的。人们一直想在石墨烯中实现局域磁矩，其中一种有效的方式就是在石墨烯中引入单原子空位缺陷。理论计算表明，石墨烯中的单原子空位缺陷会在体系中引入 σ 局域态和 π 准局域态，并且通过调节 σ 和 π 的相互作用强度可以调控它的局域磁矩。

在实验中，我们借助高分辨的扫描隧道显微镜（STM）成功探测到石墨烯中基态的单原子空位缺陷（图 1（a）），并利用自旋极化的扫描隧道谱（STS）首次探测到缺陷处的自旋劈裂现象和不同自旋电子在空间上的分布情况¹，为石墨烯中单原子空位缺陷诱导的局域磁矩提供了强有力的证据（图 1（b））。

通过第一性原理计算，我们发现缺陷附近的原子在石墨烯平面外的起伏会使体系的局域磁矩发生显著的变化。实验上，STM 针尖与缺陷附近未成键碳原子之间的范德瓦尔斯作用力可以使缺陷附近的原子在垂直石墨烯的方向上发生偏移（图 1（c））。利用此方法，我们可控地调节缺陷附近的原子结构，发现 π 电子相对于 σ 电子磁矩的大小和方向都会随原子结构发生变化²（图 1（d）），进而实现了空位缺陷的磁态在铁磁态、中间态、非磁态之间的

转变。

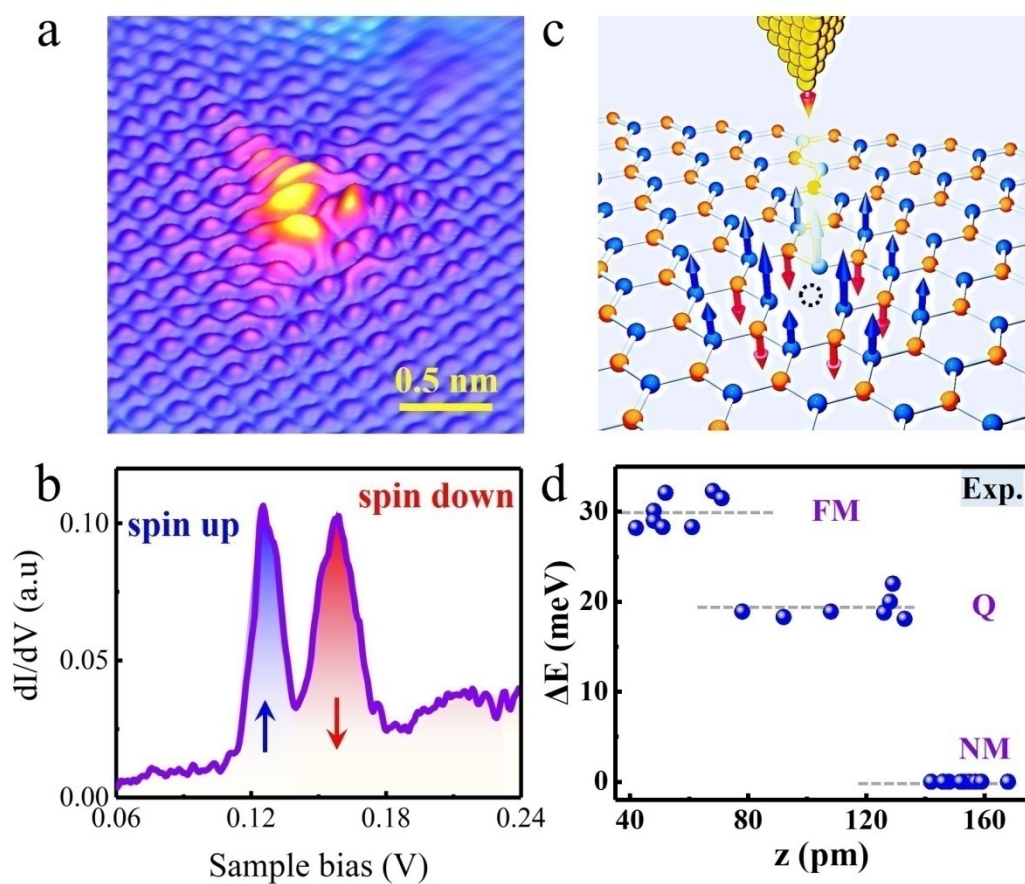


图 1 (a) 石墨烯中单原子空位缺陷的 STM 图 (b) 石墨烯中单原子空位缺陷的磁性 (c) 针尖调控空位缺陷磁性的示意图 (d) 自旋劈裂大小随未成键碳原子高度变化的关系

关键词：石墨烯、单原子空位缺陷、局域磁矩

参考文献

- 【1】 Y. Zhang et al., Scanning tunneling microscopy of π magnetism of a single atomic vacancy in graphene, Phys. Rev. Lett. 2016, 117 (16), 166801.
- 【2】 Y. Zhang et al., Tunable magnetism of a single-carbon vacancy in graphene, arXiv:1811.02277.

基金项目：国家自然科学基金项目(Nos.11674029, 11422430, 11374035),国家重点基础研究项目 (Nos. 2014CB920903, 2013CBA01603)

G2-21

专题代号： G

Strain effect on Quantum Spin Hall Phase in WTe₂-type Transition Metal Chalcogenides

Junwei Liu(刘军伟)

The Hong Kong University of Science and Technology(香港科技大学)

The discovery of quantum spin Hall (QSH) effect engendered a new chapter of topological materials research in condensed matter physics and materials science. In this talk, I will first introduce our theoretical works about QSH phases in WTe₂-type transition metal chalcogenides with 1T' structure. We predict monolayer MX₂ (M=Mo, W; X=S, Se, Te) could realize QSH insulator. Moreover, their topology can be easily tuned by external electric field, which motivated us to propose a new type of transistor, called topological field transistor. Then, I will discuss recent transport, ARPES and STM experiments on monolayer WTe₂, where many of the observations are consistent with monolayer WTe₂ being a QSH insulator. Finally, I will talk about our recent experimental and theoretical work about the strain effect on WTe₂.

G2-22

专题代号： G

Realizing nearly-free-electron like conduction band in a molecular film through mediating intermolecular van der Waals interactions

崔兴霞^{1†}, 韩鼎^{1†}, 郭宏礼^{1†}, 周林蔚², 乔思婧², 刘庆, 崔之豪¹, 李亚菲¹, 林重维³, 曹立民¹, 季威^{2*}, Hrvoje Petek^{4*}, 丰敏^{5*}

¹ 武汉大学物理科学与技术学院, 教育部人工微结构重点实验室

² 中国人民大学物理系, 北京光电功能材料微纳器件重点实验室

³Mitsubishi Electric Research Laboratories, 201 Broadway, Cambridge, MA 02139, USA

⁴Department of Physics and Astronomy and Pittsburgh Quantum Institute, University of Pittsburgh, Pittsburgh, PA 15260, USA

⁵ 武汉大学高等研究院

半导体有机分子在各类电子和光电子器件中有着广泛的应用，但是由于分子-分子之间相互构型主要是由弱的范德华相互作用决定，一般不利于电子在分子间的传输，因此电子在半导体有机分子晶体中的传输一直受到迁移率低的限制。该工作利用基底模版调制分子-基底和分子-分子间相互作用，首次在有机半导体分子晶体单层中实现类似金属的近自由电子导带。这一研究工作表明，当有机分子能按照一定的构型排列起来，即便分子之间仍然是范德华相互作用，也能产生类似由共价键或金属键这类强相互作用产生的近自由电子能带，使电子在分子间的迁移率预测有两个数量级的提高。实验工作利用扫描隧道显微镜直接在实空间描绘出了自组装在黑磷晶体表面的C₆₀有机半导体分子单层的导带电子几率密度的空间分布图。这一图像不同于以前工作中观察到的导带电子几率分布局域在C₆₀分子上的现象，表现出了电子几率密度在空间连续分布的特征。结合密度泛函理论计算，发现C₆₀分子在黑磷表面的自组装通过调制分子-基底和分子-分子间范德华相互作用构造了电子能够在分子之间自由移动的近自由电子通道。通过调制弱相互作用可以在半导体分子晶体中产生类似金属的近自由电子通道突破了对传统有机分子半导体电子结构和性能调制的认识，为设计和实现具有高迁移率的有机半导体光电器件提供了新的途径和基础理论指导。

参考资料：

1. X. X. Cui, D. Han, H. L. Guo, L. W. Zhou, J. S. Qiao, Q. Liu, Zh. H. Cui, Y. F. Li, C. W. Lin, L. M. Cao, W. Ji, H. Petek, M. Feng. Realizing nearly-free-electron like conduction band in a molecular film through mediating intermolecular van der Waals interactions. *Nat. Comm.* 10:3374 (2019).
2. H. L. Guo, X. X. Cui, W. Q. Zhou, D. Han, C. W. Lin, L. M. Cao, M. Feng. Linear scanning tunneling spectroscopy over a large energy range in black Phosphorus. *J. Appl. Phys.* 124, 045301 (2018).

二维层状过渡金属硫族化物的制备与特性研究

陈琨^{1,2}, 陶立², 万茜³, 许建斌²

1.中山大学电子学院; 2.香港中文大学电子工程系; 3.江南大学物联网学院

摘要

以石墨烯为代表的二维层状(2DL)材料,包括过渡金属硫族化物(TMDCs)、黑磷(BP)等,其种类与形态多样、而结构独特,蕴含了丰富而新奇的物理化学性质。由于其优异的光电特性,被认为是未来可能替代传统硅的新型光电子材料。高质量大面积二维材料的制备,以及相关新型微纳光电子器件开发是实现未来二维材料广泛应用的基础和前提。在本报告中我们将综合介绍在TMDCs单质与平面异质结合成制备与特性机理等方面的研究。利用CVD方法,使用可溶过渡金属盐作为前驱体,我们实现了厘米级均匀的单层MoS₂薄膜和300微米尺寸的高质量单层二维MoS₂单晶。并在OTMS-SAM自组装分子层修饰的SiO₂衬底表面,成功制备了高性能MoS₂ FET。再次基础上通过使用低成本食盐(NaCl、KCl)作催化剂,我们成功地制备出1T'相MoTe₂与WTe₂的大面积(~1mm)二维单晶,从而实现了二维碲化物的简单快速生长。将生长的二维1T'相过渡金属碲化物作为SERS衬底,我们实现了由共振吸收化学机制产生的高效表面拉曼增强效果,其分子检测的灵敏度可比于基于表面电磁场增强机制的传统贵金属衬底。根据单质二维材料的生长经验,我们分别提出了利用一步法和两步法化学气相生长过程,成功地构建了单层MoS₂-WS₂平面异质结单晶。并且利用KPFM方法,测算出MoS₂-WS₂平面异质结的内建电势、内建电场和耗尽区宽度等重要基本电子学参数,为研究TMDCs异质结光电子器件性质奠定了重要基础。

参考文献

1. K. Chen, X. Wan, W. G. Xie, J. Wen, Z. Kang, X. Zeng, H. Chen, J. Xu, Lateral Built-In Potential of Monolayer MoS₂-WS₂ In-Plane Heterostructures by a Shortcut Growth Strategy. *Advanced Materials* **27**(4),6431-6437 (2015)
2. K. Chen, X. Wan, J. Wen, W. Xie, Z. Kang, X. Zeng, H. Chen, J. B. Xu, Electronic Properties of MoS₂-WS₂ Heterostructures Synthesized with Two-Step Lateral Epitaxial Strategy. *ACS Nano* **9**(10), 9868-9876 (2015)

3. L. Tao, K. Chen, Z. Chen, W. Chen, X. Gui, H. Chen, X. Li, J. B. Xu, Centimeter-Scale CVD Growth of Highly Crystalline Single-Layer MoS₂ Film with Spatial Homogeneity and the Visualization of Grain Boundaries. *ACS Appl Mater Interfaces* **9** (13), 12073-12081 (2017)
4. X. Wan, K. Chen, W. Xie, J. Wen, H. Chen, J. B. Xu, Quantitative Analysis of Scattering Mechanisms in Highly Crystalline CVD MoS₂ through a Self-Limited Growth Strategy by Interface Engineering. *Small* **12** (4), 438-445 (2016)
5. K. Chen, X. Wan, J. B. Xu, Epitaxial Stitching and Stacking Growth of Atomically Thin Transition-Metal Dichalcogenides (TMDCs) Heterojunctions. *Advanced Functional Materials* **27**, 1603884 (2017)
6. K. Chen, Z. Chen, X. Wan, Z. Zheng, F. Xie, W. Chen, X. Gui, H. Chen, W. Xie, J. B. Xu, A Simple Method for Synthesis of High-Quality Millimeter-Scale 1T' Transition-Metal Telluride and Near-Field Nanooptical Properties. *Advanced Materials* **29** (38), 1700704 (2017)
7. X. Wan, K. Chen, Z. Chen, F. Xie, X. Zeng, W. Xie, J. Chen, J. B. Xu, Controlled Electrochemical Deposition of Large-Area MoS₂ on Graphene for High-Responsivity Photodetectors. *Advanced Functional Materials* **27**, 1603998 (2017)
8. L. Tao, K. Chen, Z. Chen, C. Cong, C. Qiu, J. Chen, X. Wang, H. Chen, T. Yu, W. Xie, S. Deng, J. B. Xu, 1T' Transition Metal Telluride Atomic Layers for Plasmon-Free SERS at Femtomolar Levels. *Journal of American Chemical Society* **140** (28), 8696-8704 (2018)

G2-24

专题代号： G

摩擦纳米发电机驱动的气体放电等离子体催化 CO₂ 还原反应

张宝、章有宁、赵柯、李素敏、向晓晨、时雪、程纲*、杜祖亮*

河南大学材料学院，特种功能材料教育部重点实验室 开封 475001

*Email: Email: chenggang@henu.edu.cn (G. Cheng), zld@henu.edu.cn (Z. Du).

摘要: 近年来, CO₂ 转化为高附加值的化学品和燃料是同时解决能源和环境问题的潜在途径。CO₂ 是一种惰性和热力学稳定的分子, 其催化转化需要大量的能量摄入来打断 C=O 双键。在热力学上, 传统的热催化必须在非常高的温度下实现 CO₂ 的还原反应 (~1800 °C), 往往

获得较低的转化率 (<1%)。在电子驱动的化学反应中 (如光催化和电催化), CO₂ 还原反应的限速步骤在于 CO₂ 分子的活化—半导体表面产生的电子转移到 CO₂ 分子上, 形成高活性的 CO₂⁻离子。事实上, 对于大多数的半导体催化剂, 导带的电子不能转移到 CO₂ 分子上, 主要是由于 CO₂ 分子的 LUMO 能级远大于半导体的导带能级, 最终导致催化反应的活性很低。因此, 寻找一种途径克服 CO₂ 的活化势垒, 产生活性 CO₂⁻离子, 可能提供一种温和、低压条件下的 CO₂ 还原方法。

基于摩擦起电和静电感应效应建立的摩擦纳米发电机是一种将无处不在的机械能转化成电能的装置, 被誉为下个世纪的新型能源收集技术^[1]。摩擦纳米发电机具有高电压的特性, 能够电离气体, 产生非热等离子体, 产生气体放电现象。基于摩擦纳米发电机的气体放电广泛应用于很多领域, 比如微量的质谱^[2]、气敏检测^[2]等。最近, 我们组发明一种依赖针-板模式的空气开关^[2], 可以利用针-板之间的距离调控摩擦纳米发电机之间的输出特性和增大摩擦纳米发电机的输出。在气体放电过程中, 其包含电子的轰击、气体分子的解离、吸附等过程, 会产生大量的活性物种包括自由基、正负离子和自由电子等。因此, 气体放电有望实现温和条件下的 CO₂ 活化。

关键词: 摩擦纳米发电机, 气体放电, CO₂ 还原, 低温等离子体催化

致谢:

【1】 Zhang et al, Tribotronics—A new field by coupling triboelectricity and semiconductor, Nano Today 2016, 4, 521-536.

【1】 Cheng et al, Managing and maximizing the output power of a triboelectric nanogenerator by controlled tip-electrode air-discharging and application for UV sensing, Nano Energy 2018, 44, 208-216.

基金项目: 中原千人计划科技创新领军人才资助(194200510004), 国家自然科学基金项目(NO.61522405), 长江学者与创新研究团队项目(PCS IRT_15R18)等

G2-25

专题代号: G

单层 MoS₂ 基 NO₂ 气体传感器的压电光电子学性能研究

郭俊猛、程纲

摘要: NO₂ 是一种有毒气体, 被认为是车辆排放、工业废气和环境检测的关键指标。开发简单, 低成本和高效率的传感器来检测 NO₂ 气体是非常有必要的。在之前的工作中, 已经广泛研究了许多纳米材料用于 NO₂ 检测, 例如碳纳米管和特定结构的金属氧化物, 其对 NO₂ 具有高的灵敏度。与传统的基于硬质基底材料的气体传感器相比, 柔性的传感器具有更为广阔的应用空间。单层 MoS₂ 具有独特的理化性能, 例如: 1.8 eV 的直接带隙, 高开关比 (> 10⁸) 和大的载流子迁移率 (> 200 cm² V⁻¹s⁻¹), 吸引了研究者的广泛兴趣。特别是其非中心对称结构所赋予的半导体压电特性, 为研究原位提高二维半导体材料基微纳器件的性能指明了方向。在本文中我们研究了压电光电子学效应对单层 MoS₂ 基 NO₂ 气体传感器性能的影响。结果表明, 通过施加拉伸应变和改变光强, 可以显著的提高基于单层 MoS₂ 的传感器对 NO₂ 气体检测的灵敏度及加快其响应(恢复)行为。应变诱导的压电势可以通过改善肖特基势垒有效地控制电子和光电子传输。高的灵敏度和快的感应特性归因于光激活自由载流子转移和压电极化诱导的肖特基势垒的改性。

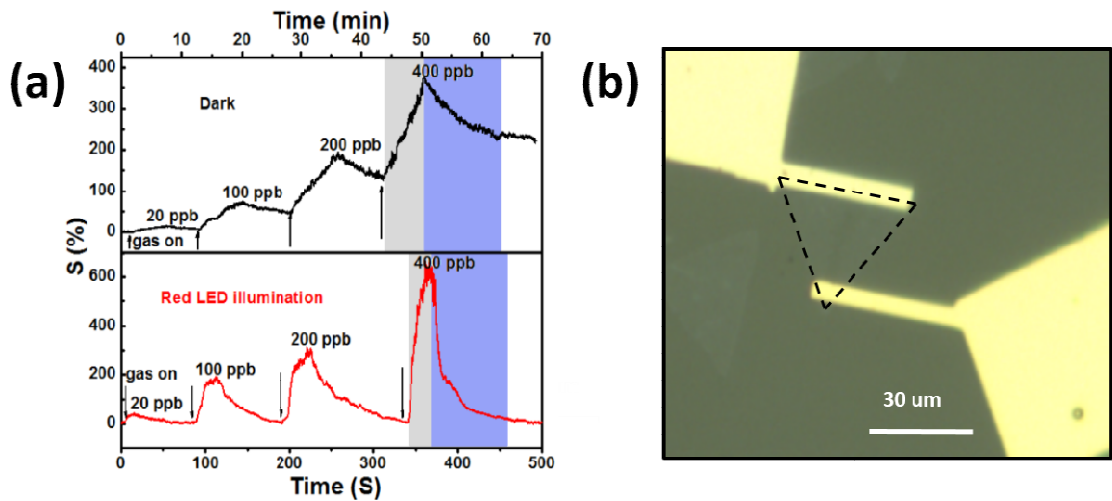


图 1 (a)NO₂ 气体传感器在不同条件下的响应恢复时间; (b)单层 MoS₂ 气体传感器的光学显微镜图

关键词: 单层 MoS₂、压电光电子学、NO₂、灵敏度

参考文献

- 【1】 Junmeng Guo et al., Piezotronic Effect Enhanced Flexible Humidity Sensing of Monolayer MoS₂, ACS applied materials & interfaces. 2018, 10 (9), 8110.

基金项目：国家自然科学基金项目（NO.51472056）

G2-26

专题代号： G

Selective trapping of hexagonally warped topological surface states in a triangular quantum corral

蒋焯平

华东师范大学，上海市东川路 500 号，200241

ypjiang@clpm.ecnu.edu.cn

关键词：拓扑绝缘体表面态，量子围栏，选择性束缚

The surface of a three-dimensional topological insulator (TI) hosts two-dimensional massless Dirac fermions (DFs), the gapless and spin-helical nature of which leads to their high transmission through surface defects or potential barriers. Here, we report the behaviors of topological surface states (TSS) in a triangular quantum corral (TQC) which, unlike a circular corral, is supposed to be totally transparent for DFs. By real-space mapping of the electronic structure of TQCs, both the trapping and detrapping behaviors of the TSS are observed. The selection rules are found to be governed by the geometry and spin texture of the constant energy contour of TSS upon the strong hexagonal warping in Bi₂Te₃. Our work indicates the extended nature of TSS and elucidates the selection rules of the trapping of TSS in the presence of a complicated surface state structure, giving insights into the effective engineering of DFs in TIs.

参考文献：Chen et al., Sci.adv. 2019, 5: eaaw3998

该项目获得了国家自然科学基金、科技部、北京未来芯片技术高精尖创新中心、国家青千计划的资助

G2-27

专题代号： G

配位场协同催化

王卫超

南开大学电光学院

weichaowang@nankai.edu.cn

以氧化物、硫化物、氮化物等为代表的过渡金属化合物近年来在高能量密度能源存储和转换器件阴极催化上取得了重要的进展。阴极催化涉及到氢，氧等的氧化和还原反应，催化反应加速了动力学的过程，降低了反应过程中的能量势垒，确保了器件存储和转换的效率。开发高效的阴极催化剂，需要理解催化反应过程和材料结构的特征关系，利用此特征关系，进一步寻找并优化催化材料。

对于过渡金属化合物（包含常见的八面体、金字塔、四面体等配位场）催化材料设计，我们提出配位场协同催化（Ligand-field acceleration of catalysis, LAOC）的概念。配位场环境对过渡金属d轨道劈裂产生较大的影响，进而改变了催化材料的催化属性。反过来讲，如果能够实现对材料配位场环境的调控，那么进而可以实现催化材料的性能的控制。我们以氧的还原(ORR)为例，探索如何通过配位场协同实现高效氧的还原催化。

此外，配位场协同催化的概念可以推广至非本征配位场协同，针对单晶体场材料，通过缺陷、界面、应力等外界因素和内部晶体场竞争、调控，实现多类型晶体场协同作用，进一步提高催化性能。

G2-28

专题代号： G

Engineering of magnetic coupling in nonbipartitenanographenes

Yuqiang Zheng^{1†}, CanLi^{1†}, Yan Zhao¹, Doreen Beyer², Chengyang
Xu¹, Dan-Dan Guan^{1,3}, Yao-Yi Li^{1,3}, Hao Zheng^{1,3}, Canhua Liu^{1,3}, Weidong
Luo¹, Xinliang Feng^{2*}, Shiyong Wang^{1,3*}, JinfengJia^{1,3*}

¹Key Laboratory of Artificial Structures and Quantum Control (Ministry of Education), Shenyang National Laboratory for Materials Science, School of Physics and Astronomy, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China

²Center for Advancing Electronics Dresden & Department of Chemistry and Food Chemistry, Technische Universität Dresden, 01062 Dresden, Germany

³Tsung-Dao Lee Institute, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai, 200240, China.

[†]These authors contributed equally to this work.

*Corresponding Authors: shiyong.wang@sjtu.edu.cn, xinliang.feng@tu-dresden.de,

jfjia@sjtu.edu.cn

Abstract

Engineering of magnetic coupling and understanding of its origin in nanographene are of peculiar fundamental importance and potential application in graphene-based spintronics. Here, we report the on-surface synthesis of a nonbipartite nanographene embedded with a five-membered ring and their atomic-scale characterization on a gold substrate. Non-contact atomic force microscopy imaging confirms the formation of atomically precise nanographene at single chemical bond level. Scanning tunneling spectroscopy reveals that the nanographene hosts a single spin via the Kondo effect. The magnetic order in covalently linked nanographene oligomers has been detected through inelastic spin-flip excitation. We found that two neighboring spins in nanographene oligomers antiferromagnetically couple with each other. The spin exchange interaction can be well engineered by tuning the position of embedded five-membered rings as well as by adjusting the angle between two neighboring nanographene units, consistent with mean-field Hubbard model calculations. Our work demonstrates the ability to engineer the magnetic coupling in nanographene with a nonbipartite lattice character.

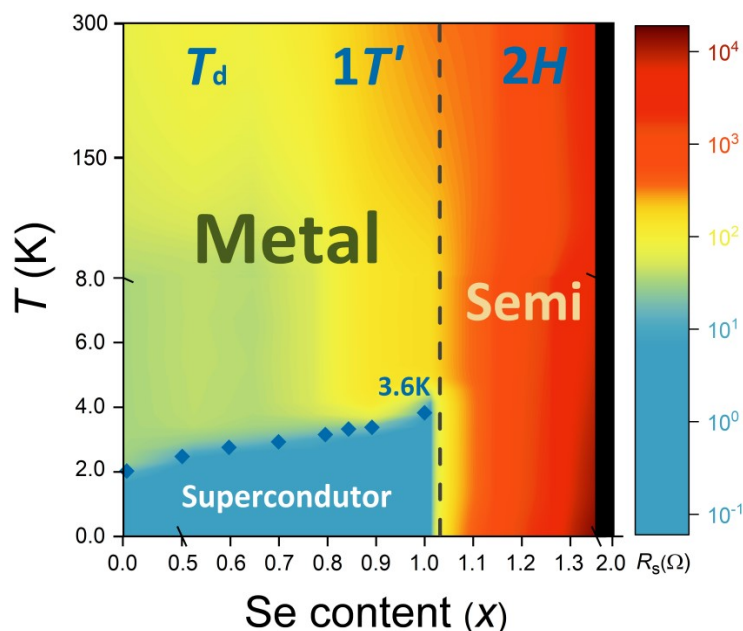
掺硒的二碲化钼薄膜中产生的相变以及超导增强现象

李沛岭、崔健、周家东、杨昌黎、吕力、林君浩、刘政、刘广同

中国科学院物理研究所, 北京 100190

Email: cioran@iphy.ac.cn

摘要: 二维过渡金属硫族化合物近年来在凝聚态物理以及材料领域均引起了极大的关注^{[1][2]}。这类材料化学式为 MX_2 (M 代表钨, 钼, X 代表碲, 硒, 硫), 通常会有 2H, 1T, 1T' 和 T_d 相。在少层的过渡金属硫族化合物中, 由强自旋轨道耦合以及丰富的晶体结构会产生了许多新物理: 在单层 2H 相中的伊辛超导^{[3][4]}, 在 1T' 相中的量子自旋霍尔效应^[5-8], 在少层 T_d 相中的非线性霍尔效应^{[9][10]} 以及非对称的自旋轨道耦合作用下的新型超导相^[11]。因此, 如果可以自由地调节过渡金属硫族化合物的晶体相, 从 2H 相到 T_d 相, 从金属到半导体, 将超导和量子自旋霍尔效应结合起来, 就有可能在同一基底上实现拓扑超导。有鉴于此, 在过渡金属硫族化合物中发展一套有效控制相变的技术, 就能够在基础研究以及相敏器件中发现新的突破。从这个想法出发, 我们在 $\text{MoSe}_x\text{Te}_{2-x}$ (with $0 \leq x \leq 2$) 样品中实现了从 T_d 相到 1T' 相再到 2H 相的转变, 并且通过调节 CVD 生长中 Se 的掺量, 该相变是完全可控的。通过拉曼光谱, 透射电镜, XPS 以及低温电输运测量实验表明, T_d 相到 1T' 相的转变在 $x \sim 0.8$ 附近, 1T' 相到 2H 相的转变在 $x \sim 1.1$ 附近。不仅如此, 随着掺 Se 量增加 ($x=0 \sim 1$), MoTe_2 中的超



导转变温度从 2.1K 增强到了 3.6K。而随着 2H 相的出现 ($x=1.1$), 在 $x>1.0$ 后, 超导完全消失了。

图 1. $\text{MoSe}_x\text{Te}_{2-x}$ 样品电阻随 Se 掺杂量以及温度变化的相图

关键词: MoSeTe , 化学气相沉积, 相变, 超导增强

参考文献

- 【1】 S. Manzeli, et al., 2D transition metal dichalcogenides. *Nat. Rev. Mater.* 2017, 2, 1.
- 【2】 Q. H. Wang, et al., Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides. *Nat. Nanotechnol.* 2012, 7, 699.
- 【3】 X. Xi, et al., Ising pairing in superconducting NbSe_2 atomic layers. *Nat. Phys.* 2016, 12, 139.
- 【4】 J. M. Lu, et al., Evidence for two-dimensional Ising superconductivity in gated MoS_2 . *Science* 2015, 350, 1353.
- 【5】 X. Qian, et al., Quantum spin Hall effect in two-dimensional transition metal dichalcogenides. *Science* 2014, 346, 1344.
- 【6】 Z. Fei, et al., Edge conduction in monolayer WTe_2 . *Nat. Phys.* 2017, 13, 677.
- 【7】 S. Wu, et al., Observation of the quantum spin Hall effect up to 100 kelvin in a monolayer crystal. *Science* 2018, 359, 76.
- 【8】 S. Tang, et al., Quantum spin Hall state in monolayer $1T'$ - WTe_2 . *Nat. Phys.* 2017, 13, 683.
- 【9】 Q. Ma, et al., Observation of the nonlinear Hall effect under time-reversal-symmetric conditions. *Nature* 2019, 565, 337.
- 【10】 K. Kang, et al., Nonlinear anomalous Hall effect in few-layer WTe_2 . *Nat. Mater.* 2019, 18, 324.
- 【11】 J. Cui, et al., Transport evidence of asymmetric spin-orbit coupling in few-layer superconducting $1Td$ - MoTe_2 . *Nat. Commun.* 2019, 10, 2044.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (Nos. 11527806 and 11874406)

G2-30

专题代号: G

摩擦纳米发电机的等离子体原位钝化对 ZnO 锌纳米线肖特基势垒紫外光探测器灵敏度及恢复性能的提升

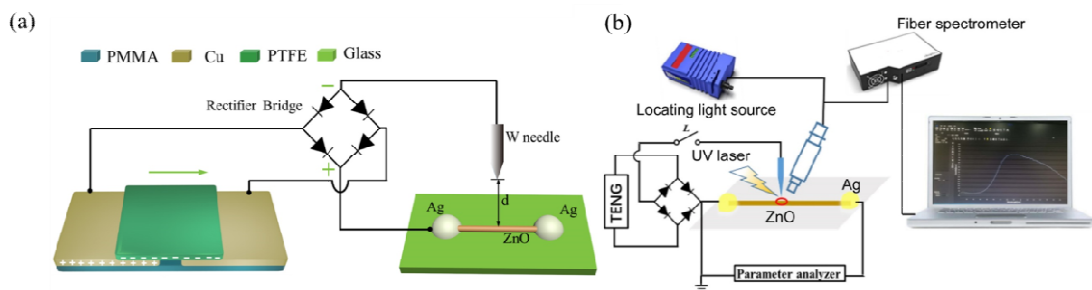
杨锋、郭俊猛、赵磊、尚婉玉、高燕远、张嵩、顾广钦、
张宝、崔鹏、程纲*、杜祖亮*

河南大学，材料学院，特种功能材料教育部重点实验室，开封，475002.

*Email:chenggang@henu.edu.cn (G. Cheng), zld@henu.edu.cn (Z. Du).

由于 ZnO 纳米线具有高的比表面积，表面缺陷及表面分子吸附引起的表面态对其物理、化学性质的影响起着关键的作用。2012 年，王中林小组基于摩擦起电效应和静电感应效应发展出摩擦纳米发电机（TENG）[1]，为机械能的采集提供了新技术。由于摩擦纳米发电机具有低廉的价格、灵活的工作模式、具有高的输出电压等优点，易于在空气中电离气体分子产生等离子体，在新材料的制备，分子检测，污染治理，电催化等方面有较大的应用前景。我们小组最近在基于摩擦纳米发电机电离气体分子构筑新型的器件进行了有益的探索[2-4]。

本文中，我们将 TENG 与 ZnO 纳米线器件组成器件系统，利用 TENG 驱动的空气放电产生的等离子体在位钝化 ZnO 纳米线的氧空位。研究表明，随着氧空位的钝化，ZnO 纳米线肖特基势垒的费米能级钉扎效应减弱，势垒高度增大。氧空位钝化后，光电流的恢复速度大大提高，光电流衰减到其 1%所需的时间从 2562.3 s 下降到 1.0 s，恢复速度提高了 2500 倍以上，最大的 GB product（Gain 和 Bandwidth 的乘积）达到提高了 111 倍。在文章中讨论了氧空位的钝化对肖特基势垒和光电流过程进行调控的机制。该研究为实现 ZnO 纳米线氧空位的在位调控、发展高性能光电器件提供了新的思路和方法。



参考文献:

1. Fan et al, Flexible Triboelectric Generator Nano Energy **2012**, 1, 328-334

2. Chenget al, Managing and Maximizing the Output Power of a Triboelectric Nanogenerator by Controlled Tip-electrode Air-Discharging and Application for UV Sensing Nano Energy **2018**, 44, 208-216.
3. Zhaoet al, The Self-Powered CO₂ Gas Sensor Based on Gas Discharge Induced by Triboelectric Nanogenerator Nano Energy **2018**, 53, 898-905.
4. Yanget al, The high-speed ultraviolet photodetector of ZnO nanowire Schottky barrierbased on the triboelectric-nanogenerator-powered surface-ionic-gateNano Energy **2019**, 60, 680-688.

基金项目：国家自然科学基金项目（NO.61522405），中原科技创新领军人才项目（(194200510004)，中国高校长江学者和创新团队研究计划（PCS IRT_15R18）。

G2-31

专题代号： G

高有序有机半导体薄膜生长和应用

黄寒、牛冬梅、孙佳、阳军亮、高永立

中南大学物理与电子学院，长沙 410073

Email: physhh@csu.edu.cn

摘要： 有机半导体薄膜已经被广泛应用于低成本、柔性、大面积的光电器件中，晶畴尺寸、晶畴生长方向、畴界和界面能级等都会影响载流子在半导体薄膜中的传输，从而影响高性能的有机光电器件的制备。在过去几年中，我们研究组以CuPc为例，系统深入地研究了高有序有机薄膜的制备过程中的相变问题，研究了高有序有机异质结薄膜的载流子输运性质，制备了高性能的光电器件：包括场效应晶体管、光敏晶体管、光存储和人造突触等。为有机半导体薄膜的应用奠定基础。

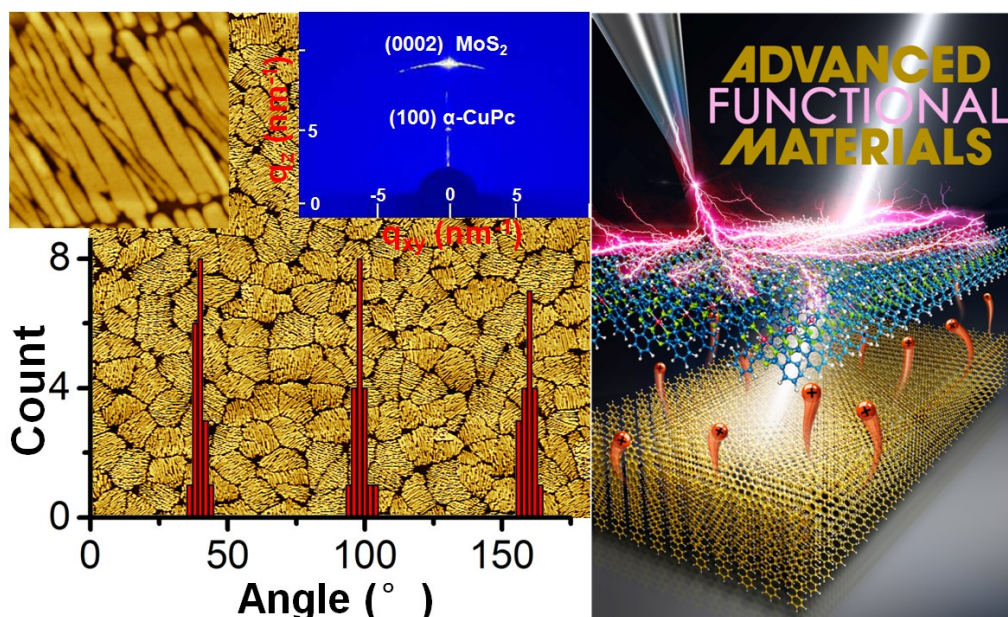


图 1 高有序 CuPc 薄膜的制备及应用

关键词：酞菁铜，开尔文探针显微镜，范德华外延，晶体管

参考文献：

- 【1】 Lei Zhang et al. J Phys. Chem. C 119(2015), 4217–4223
- 【2】 Chuan Qian et al. J Phys. Chem. C 119 (2015), 14965
- 【3】 Chuan Qian et al. Adv. Funct. Mater., 27 (2017), 1604933.
- 【4】 Chuan Qian et al. ACS Photonics, 4 (2017), 2573
- 【5】 Shitan Wang, et al, Appl. Phys. Lett. 114 (2019), 241602

基金项目：国家自然科学基金项目（NO. 11874427）等

G2-32

专题代号： G

扫描拉曼成像技术在单分子化学结构表征方面的应用

张尧、杨犇、Atif Ghafoor、张杨、罗毅、董振超*、侯建国

中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心，合肥 230026

Email: zcdong@ustc.edu.cn

摘要：由于对不同化学结构表现出的“指纹”光谱特征，拉曼光谱技术作为分析材料和分子结构的一项重要光谱学技术，已经在很多需要进行化学成分识别的领域得到了广泛应用。近

些年来,近场光学的发展为在单分子层面上实现拉曼光谱的测量提供了可能。通过构造纳腔等离激元体系,可以将电磁场局域在很小的范围内,从而获得极大的增益因子和超高的空间分辨率。进一步将拉曼光谱技术与扫描探针成像技术结合起来,可以在实空间实现对单个分子的亚纳米成像,并对分子不同的振动模式实现可视化表征。在本工作中,我们利用扫描拉曼成像技术(Scanning Raman Microscopy, SRM)实现了对单个分子化学结构的原位构建。通过对单个镁卟啉分子进行实空间的拉曼光谱成像,我们获得了对应于不同振动模式的具有埃(Å)级空间分辨率的成像图案。我们只需要从少数几个振动模式的成像图案分析得到相应的化学基团(或化学键)的成分和位置,就可以像“搭积木”一样构建单个镁卟啉分子的化学结构。我们建立的SRM技术有望在单个化学键层面实现实空间上对不同分子和材料化学组分的识别,在表面物理化学、表面催化反应、单分子科学、低维材料等需要结构表征的领域具有广泛应用。

关键词: 扫描拉曼成像技术 单分子 化学结构

参考文献

- 【1】 R. Zhang et al., Chemical mapping of a single molecule by plasmon-enhanced Raman scattering, *Nature* 2013, 498, 82–86.
- 【2】 S. Jiang et al., Distinguishing adjacent molecules on a surface using plasmon-enhanced Raman scattering, *Nat. Nanotech.* 2015, 10, 865–869.
- 【3】 R. Zhang et al., Distinguishing Individual DNA Bases in a Network by Non-Resonant Tip-Enhanced Raman Scattering, *Angew. Chem.* 2017, 129, 5653–5656.
- 【4】 J. Lee et al., Visualizing vibrational normal modes of a single molecule with atomically confined light, *Nature* 2019, 568, 78–82.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO. 21804125, NO. 21790352)、“千人计划”-青年项目、科技部项目 (No. 2016YFA0200601)

G2-33

专题代号: G

基于非线性霍尔效应的类压电效应

肖瑞春、邵定夫、江华

苏州大学物理学院与高等研究院、苏州，215006

Email: rcxiao@suda.edu.cn

二维材料的压电效应是一个新兴的研究领域，它利用应变来控制材料的电学和输运性质。压电现象的起源是由于非中心对称体系的电偶极矩的压力效应，因此目前压电研究主要集中在半导体中。由于电子屏蔽效应，金属不会出现压电效应。探索类似于电偶极矩的物理量，将有助于在金属中实现输运性质的压电响应，为金属压电的应用提供参考。最近发现的贝里曲率偶极子可以存在于金属中，并产生应变可调的非线性反常输运特性。本文预测应变会引起二维过渡金属二硫族化合物 $1H-MX_2$ ($M=Nb, Ta, X=S, Se$) 的非线性霍尔效应。利用对称性分析和第一性原理计算，我们证明了这些二维单层金属具有非线性霍尔压电特性（如下图所示）：在没有应变的情况下，由于对称性的限制 (D_{3h})，贝里曲率偶极子为零，不会出现非线性霍尔效应。单轴应变（Zigzag 或 Armchair 方向）可以有效地降低材料的对称性 (C_{2v})，引入比较大的贝里曲率偶极子，并通过数值估算，可以产生实验上可观察测的霍尔电压。这种基于非线性霍尔的类压电效应可以拓宽二维金属材料在潜在应用，丰富压电电子学的材料研究平台。

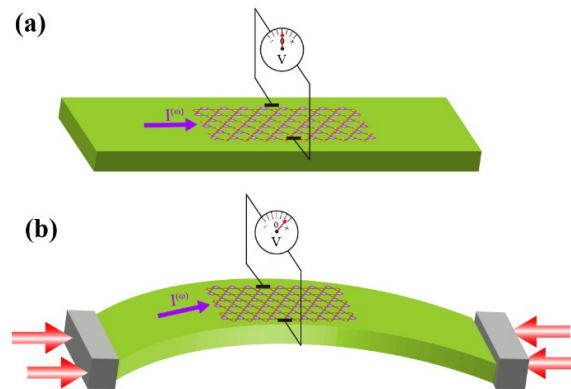


图 基于非线性霍尔效应的二维金属压电器件 (a)在没有应力的时候，激励电流 $I(\omega)$ 并不会产生非线性霍尔效应，(b)施加单轴应力，会产生非线性霍尔电压。

关键词：非线性霍尔效应、贝里曲率极矩、二维金属材料、第一性原理计算

参考文献：

- [1] I. Sodemann, L. Fu. Quantum Nonlinear Hall Effect Induced by Berry Curvature Dipole in Time-Reversal

Invariant Materials [J]. Phys. Rev. Lett., 2015, 115(21): 216806.

[2] Yang Zhang, Jeroen van den Brink, Claudia Felser, Binghai Yan. Electrically tuneable nonlinear anomalous Hall effect in two-dimensional transition-metal dichalcogenides WTe₂ and MoTe₂ [J]. 2D Mater., 2018, 5(4): 044001.

[3] Q. Ma, S. Y. Xu, H. Shen, D. MacNeill, V. Fatemi, et al. Observation of the nonlinear Hall effect under time-reversal-symmetric conditions [J]. Nature, 2019, 565(7739): 337.

[4] K. Kang, T. Li, E. Sohn, J. Shan, K. F. Mak. Observation of the nonlinear anomalous Hall effect in 2D WTe₂ [J]. Nat. Mater., 2019, 18(4): 324.

基金项目：国家自然科学基金项目（NO.11822407）

G2-34

专题代号： G

蜂窝状蛋白质芯片构建及对肝癌标志物 AFP-L3 定量检测

朱奥男^{1,2}, 张永军¹, 赵晓宇¹, 王雅新^{1,2}, 陈雷²

1.杭州电子科技大学材料与环境工程学院 310018

2.吉林师范大学材料物理与化学教育部重点实验室 130400

Email: yjzhang@hdu.edu.cn

关键词：SERS, 蛋白质芯片, AFP-L3

肝癌是一种死亡率非常高的恶性肿瘤疾病。相对于 AFP 而言, AFP-L3 的高灵敏度定量测定, 对于早期肝癌的预警、诊断以及预后监测具有非常重要的意义。本文结合二维胶体阵列及磁控溅射技术, 制备基于二维蜂窝状 Ag 纳米结构阵列的蛋白质芯片, 利用 SERS 频移技术实现对 AFP-L3 的高灵敏度定量检测。首先利用自组装技术制备出二维有序 PS 胶体阵列, 然后掩蔽刻蚀技术, 在胶体粒子边缘构造出规律的突起状成核位点。再通过旋转溅射方法, 调控溅射参数, 除了在胶体粒子表面形成帽子结构外, 在突起状部分也会优先生长纳米结构, 在此基础上延续生长并形成规则的蜂窝状阵列, 每个蜂窝中心为倒扣的帽子结构。通过对生长时间等参数的调控, 实现对峰突起状成的侧壁和半球结构之间 LSPR 耦合调制, 得到了大面积热点阵列。FDTD 模拟表明, 完整的蜂窝状阵列结构热点分布规则可控, 增强效果好。以 4-MBA 为探针分子, 以 1075cm^{-1} 为参考, 基于频移方法建立了 AFP 浓度与频

移之间的曲线。再利用金纳米粒子链接 AFP-L3 抗体，对 AFP-L3 进行特异性识别链接，建立起 AFP-L3 浓度与相对峰强 I_{1331}/I_{1071} 关系曲线，得到 0.003ng/mL 到 3ng/mL 范围内的线性关系。结果表明，采用此方法，可实现对 AFP-L3 的低浓度检测。

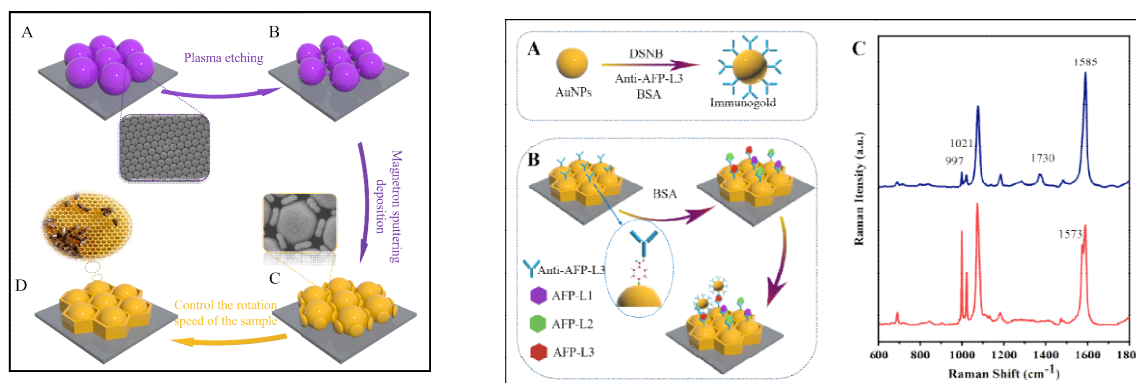


图 1 蜂窝状纳米结构制备过程

图 2 AFP, AFP-L3 蛋白质芯片构建及检测过程

致谢

感谢以下国家自然科学基金的资助(No. 61575080,61675090 and 216766115)。

参考文献

1. J. Choi, Y. Park, J. H. Kim and H. S. Kim, Clinica Chimica Acta, 2012, **413**, 170-174.
2. T. Nakagawa, E. Miyoshi, T. Yakushijin, N. Hiramatsu, T. Igura, N. Hayashi, N. Taniguchi and A. Kondo, Journal of proteome research, 2008, **7**, 2222-2233.

G2-35

专题代号： G

High-magnetic-field Tunneling Spectra of ABC-Stacked Trilayer Graphene

Long-Jing Yin (殷隆晶)¹ and Lin He (何林)²

¹School of Physics and Electronics, Hunan University, Changsha 410082, China

²Center for Advanced Quantum Studies, Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing, 100875, China

Email: yinlj@hnu.edu.cn

ABC-stacked trilayer graphene (TLG) was predicted to exhibit novel many-body phenomena due to the existence of almost dispersionless flat bands near charge neutrality point (CNP). Here, using high-magnetic-field scanning tunneling microscopy, we present Landau Level (LL) spectroscopy measurements of high-quality ABC-stacked TLG [1]. We observe an approximately linear magnetic-field-scaling of valley splitting and spin splitting in the ABC-stacked TLG. Our experiment indicates that the spin splitting decreases dramatically with increasing the LL index. When the lowest LL is partially filled, we find an obvious enhancement of the spin splitting, attributing to strong many-body effects. Moreover, we observe linear energy scaling of the inverse lifetime of quasiparticles, providing an additional evidence for the strong electron-electron interactions in the ABC-stacked TLG. These results imply that interesting broken-symmetry states and novel electron correlated effects could emerge in the ABC-stacked TLG in the presence of high magnetic fields [1,2].

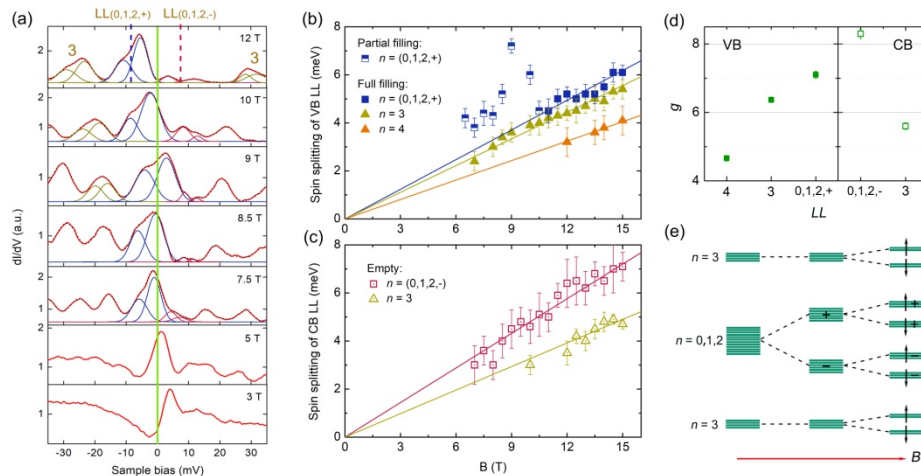


Figure 1 Broken-symmetry states and electron correlated effects in ABC TLG under high magnetic fields

Keywords

ABC-stacked trilayer graphene; scanning tunneling microscopy; flat bands; broken-symmetry states; Landau Level spectroscopy

References

- [1] L.-J. Yin, L.-J. Shi, S.-Y. Li, Y. Zhang, Z.-H. Guo, and L. He, **Phys. Rev. Lett.** **122**, 146802 (2019).
 [2] L.-J. Yin, W.-X. Wang, Y. Zhang, Y.-Y. Ou, H.-T. Zhang, C.-Y. Shen, and L. He, **Phys. Rev.** **B95**, 081402(R)

(2017).

基金项目：国家自然科学基金青年项目（No.11804089），湖南省自然科学基金青年项目（No. 2018JJ3025）

G2-36

专题代号： G

2D Wigner crystals on silicon surface induced by nanosecond pulsed laser

Zhong-Mei Huang^{a,c}, Wei-Qi Huang^{a,*}, Shi-Rong Liu^b

^a Institute of Nanophotonic Physics, Guizhou University, Guiyang 550025, China

^b State Key Laboratory of Environment Geochemistry, Institute of Geochemistry, Chinese Academy of Sciences, Guiyang 550003, China

^c Surface Physics Laboratory, Department of Physics, Fudan University, Shanghai 200433, China

Email: zmhuang@gzu.edu.cn

Abstract: During pulsed laser interaction on silicon surface, the transient electron lattices occur on plasma resonance induced from faster photons on surface in our experiment. Here, it is interesting that the electron crystals can be built on plasma surface induced by intensive faster photons on silicon, which is similar with Wigner crystal in intensive electric field or intensive magnetic field. In the two-dimensional (2D) Bravais lattices, the electron crystals of three-fold, four-fold and six-fold symmetry lattices can be observed on plasma surface by using the reflecting Talbot effect images. On these surface period lattices, the decay spectrum of faster emission on the 2D transient electron crystal was measured, which is related to the faster decay peak with lifetime of 100 ns. These new phenomena have a good application in preparing the PN junction of photo-electronic devices, where the surface electron gas on plasma surface can inject into the top layer to build N type region, and the positive ions under plasma can inject into the bottom layer for forming P type region on silicon with defects in vacuum.

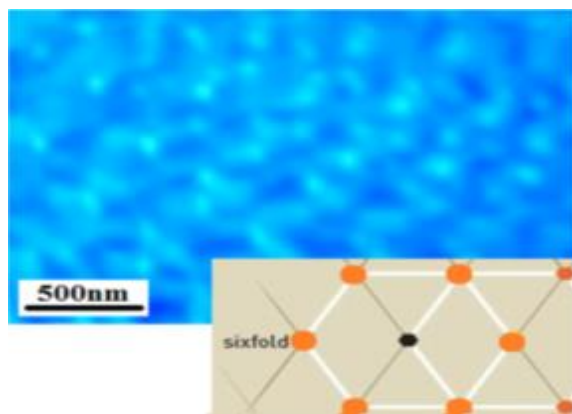


Fig.1. Hexagonal lattice of transient electronic crystal observed, in which the inset describes its six-fold symmetry

Key words: Wigner crystal; Silicon; Electron crystals; Pulsed laser

References

[1] E.P. Wigner, Phys. Rev. 46 (1934) 1002.

[2] E.P. Wigner, Trans. Faraday Soc. 34 (1938) 678.

This work was supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61465003, 11847084)

G2-37

专题代号: G

锐钛矿 $\text{TiO}_2(001)-(1\times 4)$ 表面结构的 qPlus-AFM 表征

刘建一、单欢、田韞哲、李斌、崔雪峰、王兵

中国科学技术大学, 合肥微尺度国家研究中心, 合肥 230026

Email: Bwang@ustc.edu.cn

摘要: 二氧化钛 (TiO_2) 作为金属氧化物半导体模型材料, 由于其在环境、新能源尤其是太阳能转换方面具有潜在的应用前景, 因此一直是物理、材料、化学等研究领域的重要研究对象。在 TiO_2 三种晶相中, 对于金红石和锐钛矿的研究较为广泛, 主要因为这两种晶相催化活性高, 在实际环境下可稳定存在。理论计算表明锐钛矿晶相中 $\text{TiO}_2(001)-(1\times 4)$ 重构表面的催化活性较强, 而这种较强催化活性的来源是基于 G.S. Herman 等人提出的一种增链模型 (ADM) 结构^{1, 2}。但在实际的实验测量中, 锐钛矿 $\text{TiO}_2(001)$ 表面是一个相对惰性的表面, 并非像 ADM 理论模型那样是一个高催化活性的表面, 基于这一系列实验结果和 ADM 模型之间的差异, YangWang 等人提出了一种新的氧增链模型 (AOM) 模型³, 该模型能够很好

地解释锐钛矿 $\text{TiO}_2(001)$ 表面惰性原因。我们在前期实验基础上, 将 STM 和 qPlusAFM 技术相结合, 对锐钛矿 $\text{TiO}_2(001)-(1\times 4)$ 重构表面的电子态和力场结构信息进行了高分辨表征, 通过原位同步对比发现, 该表面实际是 ADM、AOM 和缺陷多种结构混合的表面, 其中 ADM 和 AOM 两种结构的混合比例同样品制备条件存在着一一对应关系, 进一步的理论计算表明, 该种结构的混合比单一结构表面形成能更低, 更加稳定。通过这一实验研究对比, 更加清楚地解释了锐钛矿 $\text{TiO}_2(001)$ 表面的实际结构模型, 为该表面的催化反应微观机理解释提供了模型基础和支撑。

关键词: 锐钛矿 $\text{TiO}_2(001)$, STM, qPlus,

资助项目: 国家自然科学基金 (91421313, 21421063)

参考文献

[1]G. S. Herman, Structure Determination of the Two-Domain (1×4) Anatase $\text{TiO}_2(001)$ Surface, Phys. Rev. Lett, 2000, 84, 15(3354-3357)

[2]Annabella Selloni, Stress-Driven Reconstruction of an Oxide Surface: The Anatase $\text{TiO}_2(001)-(1\times 4)$ Surface, Phys. Rev. Lett, 2001, 87, 26,

[3]Yang Wang, Role of point defects on the reactivity of reconstructed anatase titanium dioxide (001) surface, Nature Communications, 2013, 10.1038

G2-38

专题代号: G

紫外 O_3p 掺杂氧化 MoX_2

刘金鑫、郑晓明、孙贻律、黄寒*

中南大学超微结构与超快过程湖南省重点实验室, 长沙 410012

Email: phyxliu@csu.edu.cn

摘要: 近年来二维过渡金属硫族化合物 (TMDCs) 由于其特有的电学、光学和光电等物理性质, 而被广泛运用于电子与光电子等器件。对于常见的 n 型二维 TMDCs 材料而言, 找到一种 p 掺杂的方法非常重要, 有助于我们研究基于 TMDCs 的高性能的逻辑器件以及发光

特性。课题组团队采用紫外臭氧氧化的方法处理少层 MoX_2 (MoSe_2 , MoS_2 , MoTe_2), 发现该方法能有效减薄 MoX_2 并对其形成 p 掺杂效果。有趣的是, 紫外臭氧氧化在 MoTe_2 和 MoSe_2 的表面形成均匀的氧化层且能逐层氧化材料, 然而在 MoS_2 的表面的氧化则优先从表面缺陷和晶界处开始氧化。这种氧化的方法不仅有效地减薄 TMDCs 的层数, 并在其表面形成 p 型掺杂, 有效的调控了材料的发光特性。

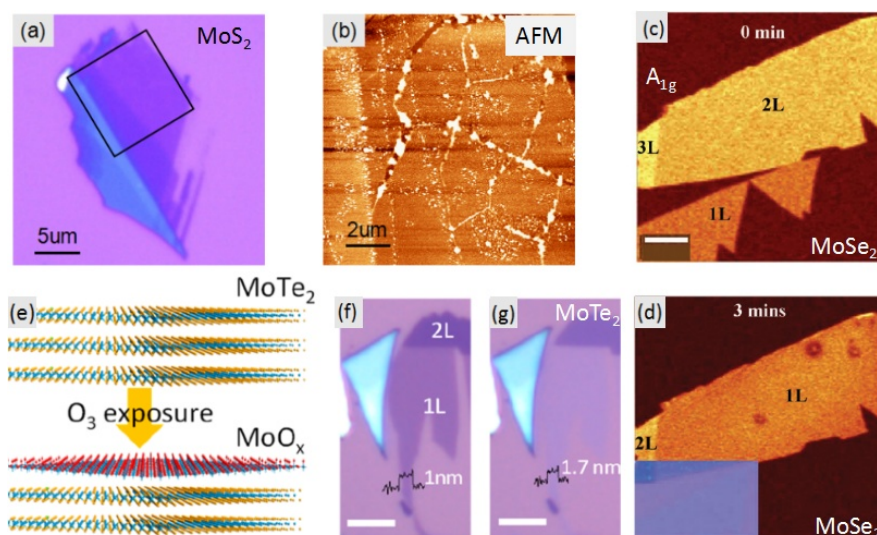


图 1 a,b 分别是氧化 6 min MoS_2 的光学图和对应的 AFM 图; c,d 分别是 MoSe_2 氧化前和氧化 3min 在 A_{1g} 模式处的 Raman mapping 图; e 图给出了 MoTe_2 氧化过程原子模型示意图, f 和 g 分别是 MoTe_2 氧化前和氧化 3min 后的光学图

关键词: MX_2 p 掺杂 PL 提升 氧化减薄

参考文献

- 【1】 Zheng, Xiaoming et al. Controlled Layer-by-Layer Oxidation of MoTe_2 via O_3 Exposure[J]. ACS applied materials & interfaces, 2018, 10(36): 30045-30050.
- 【2】 Zheng, Xiaoming ,Liu, Jinxin et al.A homogeneous p-n junction diode by selective doping of few layer MoSe_2 using ultraviolet ozone for high-performance photovoltaic devices[J].Nanoscale, 2019.(publishing)
- 【3】 Liu, Jinxin, Zheng, Xiaoming et al.The p-doping effect of Oxidating MoS_2 by Raman and PL Reseach.(in preparation)

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO.11874427 and 11874423), 湖南省自然科学基金项目 (NO.2016JJ1021), 中南大学创新驱动基金项目 (NO.2017CX018) 等

m 面蓝宝石上外延生长<010>晶向的 MoO₂ 纳米棒的研究

陈凤鸣、施娇、刘金鑫、黄寒*

中南大学物理与电子学院, 长沙 410000

Email: physhh@csu.edu.cn

摘要: 过渡金属氧化物 (TMOs) 由于其优异的性能和广泛的前景引起了广泛的关注。在 TMOs 中, MoO₂ 是一种很有前景的材料, 应用在光电探测器、锂离子电池电极和场效应晶体管等方面。众所周知, 衬底在纳米材料的外延生长中起着至关重要的作用。选定的衬底表面直接参与微纳结构的形成, 甚至决定他们的形貌和性能。本课题组已经报道过了 CVD 法在 c 面蓝宝石基底上直接合成<001>取向的 MoS₂@MoO₂ 核壳纳米棒^[1-3]。这里, 通过改变蓝宝石衬底的对称性, 在 m 面蓝宝石衬底上得到了<010>取向的 MoO₂ 纳米棒, 其取向关系为 MoO₂ (101) // 蓝宝石 (10-10), MoO₂<010>的生长方向和蓝宝石<0001>相一致。光学显微镜 (OM), 拉曼光谱, X 射线衍射 (XRD), X 射线光电子能谱 (XPS), 横截面 SEM, 高分辨透射电镜 (HRTEM) 和选区电子衍射 (SAED) 的结果表明 MoO₂ 在 m 面与 c 面上的不同的外延关系。此外, 基于单个 MoO₂ 纳米棒的器件表明, 纳米棒的结晶方向对电导率有很大的影响。我们的工作为控制 1D MoO₂ 纳米棒的生长方向提供了一种方法, 在光电探测器上有很好的应用前景。

关键词: MoO₂ 纳米棒, m 面蓝宝石, 外延关系, 生长取向, 化学气相沉积

【1】 Xie Q, Zheng X, Wu D, et al. High electrical conductivity of individual epitaxially grown MoO₂ nanorods[J]. Applied Physics Letters, 2017, 111(9): 093505.

【2】 Shi J, Wu D, Zheng X, et al. From MoO₂@ MoS₂ Core-Shell Nanorods to MoS₂ Nanobelts[J]. physica status solidi (b), 2018, 255(9): 1800254.

【3】 Wu D, Yang Y, Zhu P, et al. Epitaxial growth of highly oriented metallic MoO₂@ MoS₂ nanorods on C-sapphire[J]. The Journal of Physical Chemistry C, 2018, 122(3): 1860-1866.

基金项目：国家自然科学基金项目（NO.11874427）

G2-40

专题代号： G

PbI₂-MoS₂ 异质结:范德华外延生长及其第二类能带排列

肖君婷、刘金鑫、孙贻律、赵园、邵子依、陈凤鸣、高永立、黄寒*

中南大学物理与电子学院超微结构与超快过程研究所，长沙 410012

Email: physhh@csu.edu.cn

摘要：范德华外延生长提供了一种制备原子级清洁和电子结构分明的界面的方法。层状碘化铅(PbI₂)有很强的光吸收和光发射能力，在光电器件中有很好的应用前景。单层 PbI₂ 的间接带隙约为 3.72eV，而多层 PbI₂ 的直接带隙约为 2.38eV。相比之下，当 MoS₂ 的层数减少到单层时，会表现出由间接带隙向直接带隙的转变。本文中，我们在高真空条件下，在 CVD 生长的单层 MoS₂ 上热沉积 PbI₂ 生成 PbI₂-MoS₂ 范德华异质结，用光学显微镜(OM)、原子力显微镜(AFM)、X 射线衍射(XRD)、X 射线光电子能谱(XPS)、紫外光电子能谱(UPS)、拉曼(Raman)和光致发光(PL)光谱等手段对 PbI₂-MoS₂ 异质结进行了系统研究。XRD 和 AFM 测试结果表明，PbI₂ 在单层 MoS₂ 上以范德华外延方式存在层状堆叠。XPS 实验结果证实了 PbI₂-MoS₂ 异质结在环境中的稳定性。PL 测试表明，单层 MoS₂ 的 PL 强度在热沉积 PbI₂ 后发生了很大程度的猝灭，在 PbI₂-MoS₂ 界面处可以检测到较强的层间激子，证实为第二类能带排列，UPS 的测量结果进一步证实了这一结论。因此，我们将 MoS₂ 的 PL 强度的猝灭归因于第二类能带排列引起的不同的界面电荷转移行为[1]。

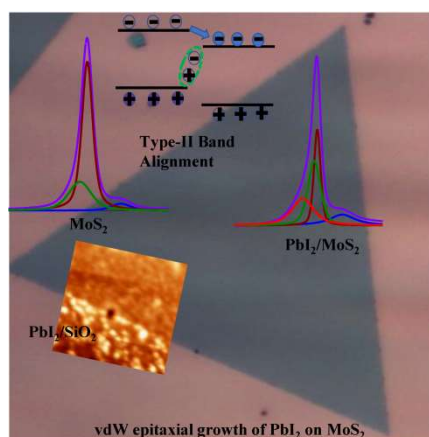


图 1 PbI_2 - MoS_2 异质结的范德华外延生长及其第二类能带排列

关键词： PbI_2 MoS_2 范德华外延 第二类能带排列 拉曼光谱 光致发光光谱

参考文献

- 【1】 J. T. Xiao, et al., PbI_2 - MoS_2 Heterojunction: Van der Waals Epitaxial Growth and Energy Band Alignment. *J. phys. Chem. Lett.* (2019) Accept

基金项目：国家自然科学基金项目(NO.11874427)

湖南省国家自然科学基金项目 (NO.2016JJ1021)

G-P001

专题代号： G

准分子激光直写聚氯乙烯（PVC）的表面改性研究

曾婷婷¹、吴坚^{1*}、王春艳²、杜永均¹、陈涛¹

¹ 北京工业大学激光工程研究院，北京 100124

² 中国航天员科学研究训练中心航天医学基础与应用重点实验室，北京 100094

Email: iceyz6@163.com

摘要：随着对高性能材料需求的不断增加，近年来材料表面工程技术发展势头迅猛。其中，聚氯乙烯(PVC)是作为一种常见高分子聚合物，因其生产成本相对较低且优良的物理化学特

性，而被广泛应用于各个领域。特别是，当PVC作为封边条基底材料与其他材料粘接时，具有防水、防化学腐蚀和抗磨损等效果，并且PVC胶粘接接头还具有重量轻、应力分布合理、外观美观等优点。这种粘接方式可以实现封边条与产品无缝连接，在工业生产中扮演着越来越重要的角色。

为了使PVC具有更佳表面特性，本研究采用193 nm准分子激光直写的方式对PVC样品表面进行了改性处理，分析了采用不同激光加工参数时，激光脉冲辐照对材料表面形貌和化学性能的影响。研究方法：首先，通过导光光路将激光垂直聚焦至PVC样品，调至预设准分子激光参数（功率、重复频率、离焦量）和位移台运动参数（速度、扫描次数）；然后，采用三维表面轮廓仪、激光共聚焦显微镜(LSCM)、扫描电镜(SEM) 和X射线光电子能谱（XPS）等分别对改性处理前后PVC样品的表面微观形貌和化学特性进行测试、对比和分析。

结果表明，经准分子激光直写改性处理后，PVC表面的粗糙度发生明显变化，当激光功率密度超过 1.08 J/cm^2 时，PVC表面形成微通道结构，表面粗糙度先下降后上升，且随着激光功率和脉冲重叠率的增加，通道宽度和深度进一步增加。PVC材料表面的碳含量增加，氧、氯含量降低，材料表面形成羟基、羰基等路易斯碱基键。研究结论：在一定条件下，改性处理后PVC表面新形成的路易斯碱基键，以及出现坚韧的熔融再凝结球滴结构和促进机械互锁的微通道结构，这些改进后的碱基键和形态特征可促进材料粘接性能增强。

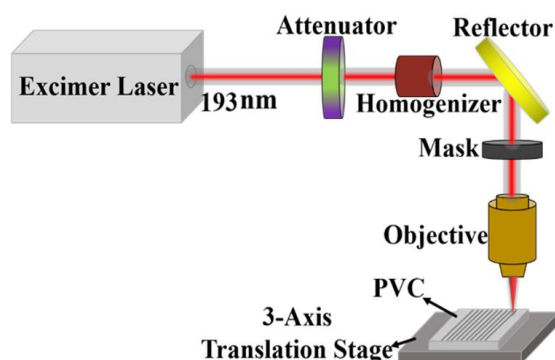


图1 准分子激光直写光学系统的示意图

关键词：聚氯乙烯 准分子激光 激光直写 表面改性处理

【1】 C Jie et al., Synthesis and application of a novel environmental C26 diglycidyl ester plasticizer based on castor oil for poly(vinyl chloride) , Journal of Materials Science . 2018, 53(12) ,8909.

基金项目：国家自然科学基金项目（NO. 51375024）

G-P002

专题代号: G

铜掺杂硫化银电子结构性质的第一性原理研究

杜春艳、赵洋洋、刘晓洁*、单桂晔

东北师范大学物理学院, 长春 130000

Email: liuxj100@nenu.edu.cn

摘要: 本文利用基于密度泛函理论的第一性原理研究了硫化银和铜掺杂硫化银的电子结构性质。计算结果表明, 硫化银晶体是带隙为 0.92eV 的准直接带隙半导体, 这一计算结果与之前文献研究的 PBE 计算结果一致。我们研究了三种可能的铜掺杂硫化银结构, 分别为: 铜取代 I 型银、铜取代 II 型银和间隙铜掺杂硫化银。我们分别计算了硫化银和铜掺杂硫化银的电子能带结构和态密度, 分析了铜掺杂前后带隙的变化。我们发现铜取代 I 型银和铜取代 II 型银的带隙几乎没有变化。相比之下, 间隙铜掺杂的带隙明显减小, 特别是在铜浓度较高的情况下。研究发现带隙减小的原因是由于导带底向下移动。我们发现导带边缘的肩峰主要来源于铜原子的 d 轨道, 间隙铜掺杂的硫化银带隙的减小是由铜原子 d 轨道的移动所致。能量分析表明, 铜取代 II 型银的结构比其它两种掺杂形式更具能量优势。第一性原理计算的间隙铜掺杂硫化银带隙的减小与实验上的吸收光谱和荧光光谱红移现象一致。在硫化银晶体中观察到铜掺杂后的明显红移, 表明实验掺杂的铜原子位于硫化银的间隙位置。

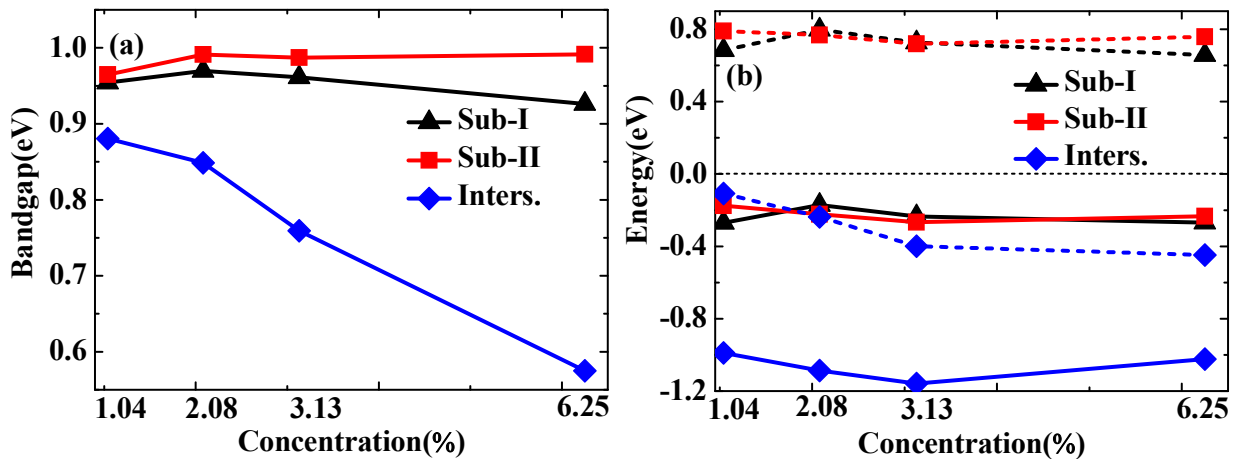


图 1 (a)和(b)分别为铜掺杂的单斜硫化银的带隙和带边随掺杂浓度的变化。(b)图的虚线为导

带底，实线为价带顶。其中 Sub_I, Sub_II 和 Inters. 分别表示铜取代 I 型银、铜取代 II 型银和间隙铜掺杂硫化银。

关键词：第一性原理 半导体化合物 掺杂 电子性质

【1】C. Du et al., First-principles study of electronic properties of Cu doped Ag₂S, J. Phys.: Condens. Matter 2018, 30, 425502.

基金项目：国家自然科学基金项目（NO. 11574044, 11774048），教育部紫外线发射材料与技术重点实验室开放项目（NO.130028608）

G-P003

专题代号： G

第一性原理研究氧化对五边形石墨烯电子性质的影响

金凯璇、李琳、杜春艳、刘晓洁*

东北师范大学物理学院 长春 130000

Email: liuxj110@nenu.edu.cn

摘要：我们使用第一性原理系统地研究了氧化对五边形石墨烯的结构和电子性质的影响。我们发现氧原子更易于吸附在 C=C 键的中心，并且氧原子和五边形石墨烯之间的相互作用是强化学键。我们的研究表明氧气分子与五边形石墨烯之间的相互作用非常强，并且易于吸附在 sp² 杂化碳原子上方。将氧气分子放置于五边形石墨烯表面 C=C 双键位置，经过结构弛豫后发现氧气分子破坏了 C=C 双键，分别形成羰基或者环氧基。研究表明氧气分子在五边形石墨烯表面的分解是没有金属参与的自分解过程。当氧气覆盖率增加时，由于导带上移，五边形石墨烯的带隙逐渐变宽。更重要的是，我们发现五边形石墨烯表面的氧分子可以在没有任何金属催化剂的情况下自分解成氧原子。计算结果表明，五边形石墨烯暴露在空气中时化学性质不稳定。因此，从实际应用的观点来看，基于五边形石墨烯的器件在暴露于空气之前必须进行封装或功能化。氧化的五边形石墨烯表现出大的带隙，这可以促进其作为电子器件中的介电层的应用。

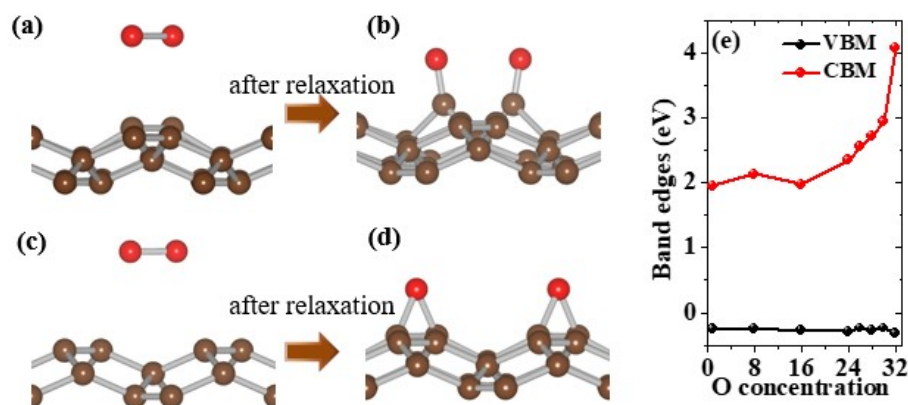


图 1 (a)-(d):弛豫前后氧气在五边形石墨烯表面吸附结构示意图; (e)导带随着氧气浓度变化示意图

关键词：五边形石墨烯，第一性原理，氧气吸附，电子结构，氧化

【1】 Kaixuan. Jin et al., The effect of oxidation on the electronic properties of penta-graphene: first-principles calculation, RSC Adv. 2019, 9, 8253-8261

基金项目：国家自然科学基金项目（NO. 11574044）

G-P004

专题代号： G

Emergent magnetic phase transitions in Fe-doped $\text{SrTiO}_{3-\delta}$

裴宇娟, 张如意, 宋洋, 毕佳畅, 曹彦伟*

中科院宁波材料所, 浙江宁波, 邮编 315201

*Email: ywcao@nimte.ac.cn

摘要: In defect engineering, the roles of cation doping and oxygen vacancy are generally played individually in tailoring materials and the utilization of their cooperation is rare. Here, we report an emergent magnetic phase transition near 18 K in Fe-doped $\text{SrTiO}_{3-\delta}$ with the presence of both Fe dopants and oxygen vacancies. The effects of defect engineering on crystal and magnetic structures were characterized with Raman spectroscopy and superconducting quantum interference device, respectively. Moreover, with decreasing the temperature across the magnetic phase transition, the coercivity of Fe- $\text{SrTiO}_{3-\delta}$ increases from 104 Oe at 19 K to 7700 Oe at 2 K. Our results of creating emergent magnetic phases with the coeffects of both cation dopants and

oxygen vacancies pave a route to inducing novel quantum states in epitaxial films on Fe-SrTiO_{3-δ} single crystal substrates with the magnetic proximity effect.

关键词: Magnetic phase transitions, cation doping, oxygen vacancy

G-P005

专题代号: G

解离和非解离乙酸在 TiO₂-B 表面吸附的理论研究

苑晓嘉、闫薇、刘晓洁

东北师范大学物理学院, 长春 130000

Email: yuanxj587@nenu.edu.cn

摘要: 由于能源和环境危机, 寻找可持续和可再生能源是一项十分紧迫的任务。乙酸是糠醛废水中的主要污染物, 而糠醛废水是一种很难用常规生化工艺处理的废水。因此, 乙酸的催化氧化在解决环境问题研究中引起了广泛的关注。近年来, TiO₂-B 因其在锂离子电池、电极和染料敏化太阳能电池中的潜在应用而受到越来越多的关注。人们发现 H₂O 分子、CO 分子、NH₃ 分子可以以解离和非解离形式吸附在 TiO₂-B 不同表面。因此, 我们设计了乙酸在 TiO₂-B 的不同晶面上的解离和非解离模型, 并研究了其相关性质。

课题组团队通过第一性原理计算, 研究了非解离和解离的乙酸在 TiO₂-B(001)、(110)、(010)和(100)表面的吸附。结果表明, 与非解离相比, 解离的乙酸在 TiO₂-B 表面的吸附能较好。在解离模式中, 乙酸在 TiO₂-B(001)、TiO₂-B(110)、TiO₂-B(010)和 TiO₂-B(100)上的吸附能分别为-0.685eV、-1.496eV、-1.688eV 和-1.677eV。乙酸在 TiO₂-B(010)和 TiO₂-B(100)上的吸附能相似, 表明吸附过程不会表现出选择性。但是我们发现吸附构型不仅与匹配的界面结构有关, 还与 Lewis 酸(Ti*)和 Lewis 碱(O*)位上的静电势分布有关。TiO₂-B(010)的 Lewis 酸(Ti*)和 Lewis 碱(O*)位上的静电势差最大, 为 6.49V, 大于乙酸在其他 TiO₂-B 表面的静电势差。这种振荡静电势为促进乙酸解离提供了额外的驱动力。

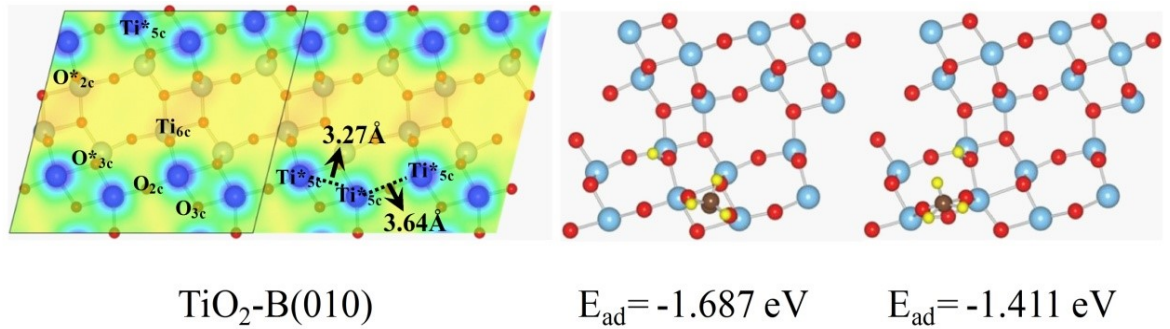


图 1 解离乙酸吸附在 TiO₂-B(010)表面的静电势分布、构型以及吸附能

关键词：密度泛函理论；二氧化钛；TiO₂-B 表面；乙酸；单齿吸附；双齿吸附；静电势

参考文献

- 【1】 L. Qi, Y. Liu, C. Li, Controlled synthesis of TiO₂-B nanowires and nanoparticles for dye-sensitized solar cells, Appl. Surf. Sci. 257 (2017) 1660-1665.

基金项目：国家自然科学基金项目（NO. 11574044）等

G-P006

专题代号： G

基于光发射电子显微镜的单层 WS₂ 波长依赖的载流子动力学研究

李耀龙、胡小永、龚旗煌

北京大学物理学院，北京 100871

Email: yaolong@pku.edu.cn

摘要：过渡金属硫族化合物超快载流子动力学的远场研究已经有很多报道，远场的研究手段包括瞬态吸收光谱和时间分辨荧光光谱等等。相对于远场研究而言，近场研究能够提供一些新的有趣的信息。然而，超快载流子动力学的近场方面的研究在实验上仍然比较困难。

本课题组采用光发射电子显微镜（photoemission electron microscopy, (PEEM)) 从近场角度研究单层二硫化钨（WS₂）超快载流子动力学。结合飞秒激光泵浦探测技术和 PEEM 的超高空间分辨能力和 150meV 的能量分辨能力，我们能够获得时间、空间和能量尺度的载流子动力学信息。实验上，单层 WS₂ 和 p-Si 衬底组成异质结结构，部分 WS₂ 被厚度变化的

hBN 层隔开。通过调节泵浦光波长（从 610 nm 到 410 nm）使其与 K 谷实现近共振和非近共振激发，来研究载流子在 K 谷的行为，实验中保持波长 273 nm 的探测光不变。另外，结合能量分析仪和时间分辨测量，我们也观测到了载流子在能量上的布居随时间的演化过程。与非近共振激发相比，近共振激发具有更长的载流子寿命和更窄的能量布居。另外，WS₂ 的载流子动力学受到了衬底的严重影响（即便是有对 hBN 隔离的 WS₂ 区域），原因可能为静电掺杂效应（doping effect）或者电荷从 WS₂ 到衬底的转移。PEEM 能够同时获得不同厚度 hBN 隔离层区域的 WS₂ 载流子动力学，在较厚 hBN (~48 nm) 区域的 WS₂ 载流子寿命比薄层 hBN (~8 nm) 区域的略长。这意味着 WS₂ 和 p-Si 之间的具有非常强的电荷转移和静电掺杂，这也与 WS₂ 在 p-Si 上有严重的荧光猝灭（quenching）相一致。本项研究表明 p-Si 对二维材料的性质具有很大的影响，这一点在设计二维光电子器件与硅或其他传统半导体集成的时候需要考虑。

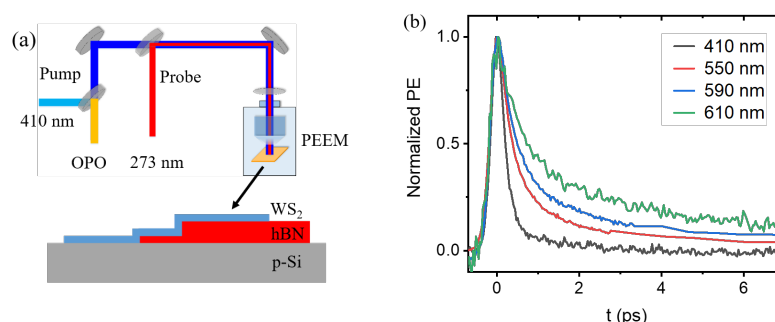


图 1 实验示意图 (a) 及 WS₂ 泵浦探测信号随泵浦光波长的变化 (b)

关键词：WS₂ TMD 载流子动力学 光发射电子显微镜

G-P007

专题代号： G

二维材料石墨炔在燃料电池和金属-空气电池中的应用

冯振^{1,2}、戴宪起¹

¹河南师范大学 物理学院, 新乡 453000, ²河南工学院 材料科学与工程学院,

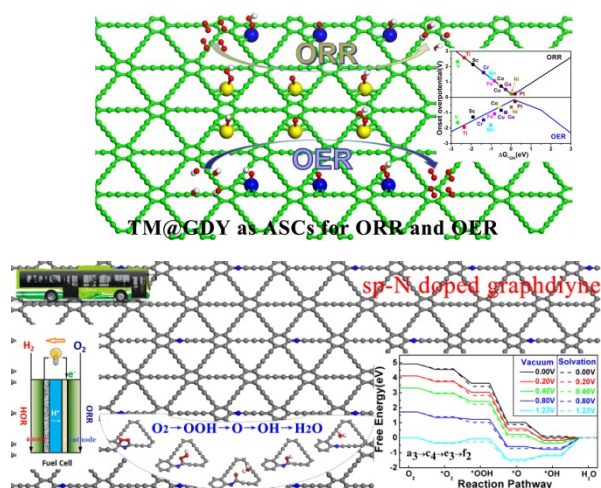
新乡 450000

Email: xqdai@htu.edu.cn

摘要：氧还原反应（ORR）是能源储存和转化的重要技术，在燃料电池、金属-空气电池等领域有重要应用。经典的 ORR 电催化剂为贵金属铂，但其价格昂贵且易于中毒失活，不利

于大规模应用。近年来，人们在非 Pt 催化剂和非金属 ORR 催化剂体系上做了大量研究，其中氮掺杂碳材料被认为是极具潜力的非金属 ORR 催化剂。石墨炔（GDY）作为一种新型二维碳材料，具有丰富的碳化学键、大的共轭体系、宽面间距以及优良的化学稳定性。由于其特殊电子结构及优异半导体性能，可广泛应用于电子、半导体以及新能源领域。我们利用第一性原理计算了 sp-N 掺杂石墨炔的 ORR 催化活性。动力学分析表明 ORR 反应路径为典型的四电子联合机制，即 $O_2 \rightarrow OOH \rightarrow O + H_2O \rightarrow OH \rightarrow H_2O$ 。紧邻 sp-N 的 sp-C 原子在反应过程中失去电子是催化活性位点。这种 sp-N 掺杂的石墨炔材料表现出非常优异的 ORR 性能。

GDY 中 sp 杂化态形成的碳-碳三键具有线性结构、无顺反异构体和高共轭等优点，可为单个金属原子提供锚定位点，实现金属-载体相互作用的最大化，是一种理想的单原子催化剂载体。我们利用第一性原理研究了 GDY 锚定过渡金属单原子（TM@GDY）的氧还原和析氧反应（ORR 和 OER）双功能催化活性。碱性环境下，Ni@GDY 和 Pt@GDY 单原子催化剂的 ORR 的过电势为 0.45 V，Pt@GDY 的 OER 的过电势为 0.49 V。



(a) TM@GDY 单原子双功能催化剂 (b) sp-N 掺杂 GDY 氧还原催化示意图

图 1 石墨炔锚定金属原子及氮掺杂石墨炔的催化活性

关键词：石墨炔，燃料电池，金属-空气电池，单原子催化剂，异质原子调控

参考文献

- 【1】 X. dai et al., Graphdiyne doped with sp-hybridized nitrogen atoms at acetylenic sites as potential metal-free electrocatalysts for oxygen reduction reaction, J. Phys-Condens Mat. 2019, doi.org/10.1088/1361-648Xab3350.

基金项目：国家自然科学基金项目（Nos.61674053, 162300410325），河南省高校科技创新人

才基金项目 (No.18HASTIT030), 河南省高等学校学科创新引智基地资助 (CXJD2019005) 等。

G-P008

专题代号: G

Facile and Versatile Functionalization of Two-Dimensional Carbon Nitrides by Design: Magnetism/Multiferroicity, Valleytronics, and Photovoltaics

Lei Li¹(黎磊)、Menghao Wu¹(吴梦昊)、Xiao Cheng Zeng²(曾晓成)

¹School of Physics and Wuhan National High Magnetic Field Center, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, Hubei, China 430074

²Department of Chemistry, University of Nebraska-Lincoln, Lincoln, NE 65588

Email: wmh1987@hust.edu.cn (MHW); xzeng1@unl.edu (XCZ)

Abstract: Many graphitic carbon nitrides synthesized in the laboratory are featured with periodic and uniform cavities. Here, we show ab initio calculation evidence that the two-dimensional (2D) carbon nitrides may enable the “facile functionalization” when a domain of carbon nitride is wetted by a solution of metal halides with mobile cations/anions. During the wetting process, each cavity can be easily functionalized by a unit of metal halide. Compared with the prevailing functionalization or doping strategies through either high-temperature diffusion of source ions or through ion implantation by using accelerators, such room-temperature “wet-lab” functionalization approach is more facile and efficient. More importantly, the wet-lab functionalization not only can facilitate isolation of 2D monolayer, but also enable various new and desirable properties by using different metal halides. Examples of novel properties enabled include 2D magnetism and 2D ferroelectricity with high piezoelectric coefficient. The latter may implement spin-independent valleytronics for non-volatile electrical manipulations. Moreover, the wide bandgap of carbon nitrides can be reduced for applications in nanoelectronics and photovoltaics. The tunable bandgaps, ranging from 1.0 to 2.5 eV, can be realized by controlling

the metal-halide functionalization density, while the separation of electrons/holes can be facilitated by the ferroelectric polarizations and heterostructure band alignments. P/N doping and PN junctions can be also realized. Especially, multifunctional domains like P/N doped or magnetic/ferroelectric regions can be selectively constructed through such functionalization with different halides, followed by direct integration into a single sheet of carbon nitride, akin to the P/N channels in silicon wafers.

Keywords: facile and versatile functionalization; two-dimensional carbon nitrides; bandgap tuning; magnetism/multiferroicity; valleytronics

基金项目：国家自然科学基金项目（Nos. 21573084）

G-P009

专题代号： G

盛有液体的振动容器中气泡下沉现象的简单探究

王绍政

南开大学，天津 300071

Email: 821839285@qq.com

摘要: 当盛有液体的容器振动时, 其中的气泡会下降而不是上升。在实验中, 我们可以发现, 这种现象和振动的频率、振幅有关。同时, 并不是液体中所有产生的气泡都会出现下降现象, 下降现象的产生还取决于气泡出现的位置, 气泡的产生位置越深, 越容易出现下沉的现象, 实验中可以发现, 存在一个较为明显的分界面, 分界面以上的气泡基本不会出现下沉现象, 分界面以下的气泡极其容易出现下沉现象。由于这个分界面的存在, 暂时认为在实验可以产生的气泡大小条件下, 不同的气泡半径并不会对于现象的出现造成显著影响。实验发现这个分界面所在的深度不是一个定值, 对于同种液体, 实验发现的分界面所在的深度与液体的总深度、振动的频率、振动的振幅均有关系。可以猜想到, 分界面所在的深度与液体的总深度之比应该是一个与振动的频率以及振动的振幅相关的函数。为了进一步探究振动液体中的气泡下沉的现象, 我们考虑了气泡在液体中所受的浮力、粘滞阻力、容器振动带来的惯性力以及气泡的附加质量以后, 应用牛顿第二定律列出了振动容器中液体气泡的动力学方程, 以水

为例，假定了气泡的半径，改变振动的频率、振幅，使用软件 *Mathematica* 进行了一系列的数值模拟，与实验所得结论相互得到了一定程度的验证。可以发现，在实验条件下，频率和振幅越大，分界面相对液面位置也越高。

关键词：振动 气泡

参考文献

【1】 V.S. Sorokin, I.I. Blekhman, V.B. Vasilkov, Motion of a gas bubble in fluid under vibratio,,*Nonlinear Dynamics* 2012, 67,147-158

【2】 F. Zoueshtiagh, H. Caps, M. Legendre, N. Vandewalle, P. Petitjeans, P. Kurowski. Air bubbles under vertical vibrations, *The European Physical Journal E*,2006, 20,317-325

G-P010

专题代号： G

Anomalous quantum Griffiths singularity in ultrathin crystalline lead films

Yi Liu¹, Ziqiao Wang¹, Pujia Shan¹, Yue Tang¹, Chaofei Liu¹, Cheng Chen¹, Ying Xing¹, Qingyan Wang¹, Haiwen Liu², Xi Lin¹, X. C. Xie¹, Jian Wang¹

¹International Center for Quantum Materials, School of Physics, Peking University, Beijing 100871, China.

²Center for Advanced Quantum Studies, Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China.

Email: yiliu61@pku.edu.cn

摘要： Superconductor-insulator/metal transition (SIT/SMT) represents a prototype of quantum phase transition, where quantum fluctuation plays a dominant role and dramatically changes the physical properties of low-dimensional superconducting systems. Recent observation of quantum

Griffiths singularity (QGS) offers an essential perspective to understand the subtleties of quantum phase transition in two-dimensional superconductors. Here we study the magnetic field induced SMT in ultrathin crystalline Pb films down to ultralow temperatures. The divergent critical exponent is observed when approaching zero temperature quantum critical point, indicating QGS. Distinctively, the anomalous phase boundary of SMT that the onset critical field decreases with decreasing temperatures in low temperature regime distinguishes our observation from previous reports of QGS in various two-dimensional superconductors. We demonstrate that the anomalous phase boundary originates from the superconducting fluctuations in ultrathin Pb films with pronounced spin-orbit interaction. Our findings reveal a novel aspect of QGS of SMT in two-dimensional superconductors with anomalous phase boundary.

关键词： 2D crystalline superconductor, superconductor-metal transition, anomalous quantum Griffiths singularity, superconducting fluctuation, spin-orbit interaction

参考文献

1. Y. Liu et al., Anomalous quantum Griffiths singularity in ultrathin crystalline lead films, arXiv: 1809.09353

(Accepted by Nature Communications)

基金项目：该工作得到了国家自然科学基金、国家重点研发计划、中国科学院战略性先导科技专项培育项目、北京市自然科学基金、中央高校基本科研基金等经费的支持。

G-P011

专题代号： G

Rich coverage-dependent phases induced by sub-monolayer surface segregation of carbon on Pt(111) at 78 K

X.X. Li¹, Q.L. Li¹, B.F. Miao^{1,2}, L.Sun^{1,2}, H.F. Ding^{1,2}

¹ National Laboratory of Solid State Microstructures and Department of Physics, Nanjing

University, 22 Hankou Road, Nanjing 210093, PR China

² Collaborative Innovation Center of Advanced Microstructures, Nanjing University, 22 Hankou Road, Nanjing 210093, PR China

Email: hfding@nju.edu.cn

摘要: We report on the investigation of the coverage-dependent rich phases formed by segregated carbon atoms on Pt(111) at 78 K utilizing low energy electron diffraction (LEED) and scanning tunneling microscopy (STM). Very different initial carbon phases can be obtained by slightly varying the annealing conditions. We found that structures strongly depend on coverage. And the transitions between different phases can be observed at 78 K as the rate of surface carbon segregation slows down to proper scale for STM investigation. At coverage of ~ 0.25 ML, the carbon atoms form three domains with a relative rotation of 120° and each of the domain consists of a rectangular structure $(\sqrt{3} \times 2)$ rect-1C. Keeping the sample at 78 K, more and more carbon atoms segregate from the bulk Pt and the carbon coverage increases. Interestingly, when the coverage reaches ~ 0.3 ML, the carbon atoms prefer to form multi-clusters with 7–17 atoms and the atomic arrangement within cluster is $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$. Surprisingly, the carbon atoms can hop between neighboring clusters occasionally, but not aggregate due to the repulsion between atoms. With further increasing coverage to ~ 0.5 ML, the structure changes back to a rectangle but with $(\sqrt{3} \times 2)$ rect-2C structure. And at ~ 1.0 ML, the structure evolves back to a three-fold structure, i.e., a close-packed (1×1) structure. Microscopically, the structure undergoes a series of striking transitions with the increasing carbon coverage. Macroscopically, the three-fold symmetry of Pt(111) is still maintained as rectangular structures are accompanied by three domains with relative rotation of 120° . Our results provide an insight on the carbon coverage-dependent structure evolution on Pt(111).

关键词: surface reconstruction, scanning tunneling microscopy (STM), carbon, platinum, surface segregation.

资助项目: 国家重点研发计划 (No. 2017YFA0303202, 与 No. 2018YFA0306004), 国家自然科学基金项目 (No. 51571109, No. 51601087, No. 11734006, 与 No. 11727808) 与中国博士后科学基金 (No. 2019M651766).

Green's function approach to the Kondo effect in nanosized quantum corrals

李启立¹、王锐^{1,2}、谢克学¹、李小霞¹、郑超¹、曹荣幸^{1,3}、缪冰峰^{1,4}、
孙亮^{1,4}、王伯根^{1,4,*}、丁海峰^{1,4,*}

¹ 南京大学固体微结构物理国家重点实验室和物理学院 南京 210093

² 上海交通大学物理与天文学院 上海 200240

³ 扬州大学物理科学与技术学院 扬州 225002

⁴ 南京大学人工微结构科学与技术协同创新中心 南京 210093

Email: hfding@nju.edu.cn, bgwang@nju.edu.cn

Abstract: Recent experimental observation showed that the Kondo temperature of Co adatoms placed at the center of nanocorrals on the surface of Ag(111) oscillates strongly as a function of the diameter of the corral built by multiadatoms [Phys. Rev. B **97**, 035417 (2018)]. The understanding of the effect demands a theory to describe the Kondo effect in the condition that multiadatoms are involved. We present a theoretical study of the Kondo effect for a magnetic atom placed inside nanocorrals using Green's function calculations. Based on the standard mapping of the Anderson impurity model to a one-dimensional chain model, we formulate a weak-coupling theory to study the Anderson impurities in a hosting bath with a surface state. With further taking into account the multiple scattering effect of the surrounding atoms, our calculations show that the Kondo resonance width of the atom placed at the center of the nanocorral can be significantly tuned by the corral size, in good agreement with the experiments. The method can also be applied to the atom placed at an arbitrary position inside the corral where our calculation shows that the Kondo resonance width also oscillates as the function of its separation from the corral center. The prediction is

further confirmed by the low-temperature scanning tunneling microscopy studies where a one-to-one correspondence is found. The good agreement with the experiments validates the generality of the method to the system where multiadatoms are involved.

Keywords: Kondo effect, Green's function approach, quantum corrals, STM/STS

资助项目：国家重点研发计划（2017YFA0303202）、国家自然科学基金（51571109, 51601087, 11374145, 11734006）和江苏省自然科学基金（BK20150565）

G-P013

专题代号： G

Novel two-dimensional alkaline earth metal halide as high capacity anodes for ion batteries

Lin-Lin Liu¹, Han-Yu Liu², Yu Xie^{2*} and Yan-Ming Ma^{1,3*}

¹State Key Lab of Superhard Materials, College of Physics, Jilin University, Changchun 130012, China

²Innovation Center for Computational Physics Methods and Software & State Key Lab of Superhard Materials, College of Physics, Jilin University, Changchun 130012, China

³International Center of Future Science, Jilin University, Changchun 130012, China

Searching for high performance electrode materials is one of the key factors for next generation renewable energy technologies. Two-dimensional(2D) monolayer materials are widely used in rechargeable batteries due to their high electrochemical performance and high surface ratio. In this study, we take the first-principles swarm-intelligence structure calculations to research the properties of a newly predicted 2D MX (M= Be, Mg, Ca, Sr; X = F, Cl, Br, I) serve as an anode material for lithium-ion batteries (LIBs), sodium-ion batteries (SIBs) and potassium-ion batteries

(PIBs).The predicted 2D MX sheets exhibit great stabilities, and excellent electrode performances.Furthermore, the Mg_2Cl_2 sheet exhibits superior LIB and SIBperformances with high theoretical storage capacities (448.51 and 897.03 $mAhg^{-1}$) and small diffusion energy barriers (0.29 and 0.16 eV) for Li and Na atoms, respectively. The 2D Ca_2F_2 not only preserves the large Li/Na/K capacity (907.33 $mAhg^{-1}$), but also has low Li/Na/K diffusion energy barriers (0.18 eV for Li, 0.09 eV for Naand 0.1 eV for K) insure Li/Na/K atoms easily transported on the surface.Our theoretical results highly support that Mg_2Cl_2 and Ca_2F_2 would be a good anode material for ion batteries.

G-P014

专题代号： G

ZrC(001)负载 Pd 单层催化氧还原反应的第一性原理研究

刘宁、毛建军、杨宗献

河南师范大学物理学院，新乡 453007

Email: lnywzq@163.com

摘要：传统化石燃料的大量使用，导致了能源危机和环境污染等一系列问题，迫使人们开发新型绿色可再生能源。质子交换膜燃料电池（PEMFCs）因其工作温度较低、无污染、能量转化效率高等优点，受到了人们的广泛关注。在 PEMFCs 中，阳极发生 H_2 的氧化反应（HOR）、在阴极发生 O_2 的还原反应（ORR），生成零污染的产物 H_2O 。但是阴阳两极反应速率存在显著差别，与 HOR 反应速率相比，ORR 的反应速率要低几个数量级，一定程度上限制了 PEMFCs 的广泛应用。为了提高反应速率，目前广泛使用的催化剂是 Pt 纳米颗粒负载在炭黑上（Pt/C）。然而 Pt/C 催化剂却存在 Pt 价格昂贵、地壳储量低、易 CO 中毒、C 易被腐蚀等缺点，降低了催化效果。因此，开发廉价、高稳定性、高活性的新型催化剂成为研究热点。

本文中，我们设计不同覆盖度的 Pd 负载在 ZrC（001）上（ $Pd_n/ZrC（001）$ ）作为 ORR 催化剂。由于 ORR 发生在复杂的电化学环境中，模拟全部过程需要消耗大量的计算资源，而 O_2 的解离是 ORR 反应中关键的一步，并且在水煤气反应、CO 氧化等反应中都起到重要作用。因此，基于密度泛函理论的第一性原理方法，我们选用 O_2 的解离作为催化活性探针，系统研究了 O_2 在 $Pd_n/ZrC（001）$ 面上的吸附、扩散和解离。研究发现 Pd-C 之间存在强相

互作用，使 Pd 不易发生团聚，在 ZrC 表面形成稳定的单层，并且 Pd 均吸附在 C 顶位，可以保护 ZrC 表面不被氧化，提高催化剂的稳定性。另外，Pd-C 之间的强相互作用，大大改变了 Pd 的电子结构，提高了催化活性。单层 Pd 负载在 ZrC (001) 上 (Pd_{ML}/ZrC (001))，显著提高了 O₂ 的捕获能力，O₂ 在其上具有较低的解离势垒 (0.55 eV, 0.37 eV)，同时对 O 原子具有适中的吸附强度，解离后的 O 原子在其上很容易扩散。因此，Pd_{ML}/ZrC (001) 有望用作高效的 ORR 催化剂。

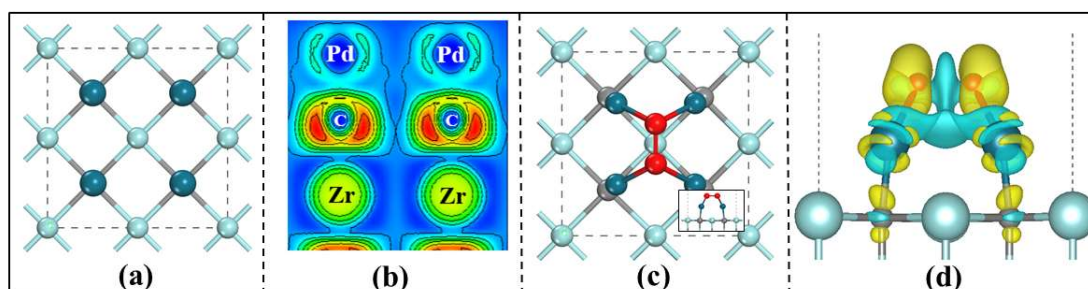


图 1 Pd_{ML}/ZrC (001) 结构图 (a) 及其 ELF 图 (b), O₂ 吸附在 Pd_{ML}/ZrC (001) 上结构图 (c) 及其 CDD 图

关键词：ZrC (001) Pd 单层 密度泛函理论 氧还原反应

基金项目：国家自然科学基金项目 (NO. 11874141, U1804130, 11474086)

G-P015

专题代号： G

Experimental Evidence of the Topological Surface States in Mg₃Bi₂ Films Grown by Molecular Beam Epitaxy

Tong Zhou、Xie-Gang Zhu、Zhen-Yu Wang

National University of Defense Technology, Changsha 410073

Institute of Materials, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621700

Email: zhoutongnudt@163.com

Abstract: Topological surface states (TSSs) are a class of novel electronic states with great potential for topological quantum computation and spintronics applications. Materials with TSSs, such as topological insulators and topological semimetals have emerged in the past decade as a

major research focus in condensed matter physics. Nodal line semimetals (NLSs) are novel proposed topological solid-state phases which host one-dimensional closed loops or line degeneracies formed by the intersection of two bands. It is proposed as type-II NLSs when the linear spectrum at every point of the nodal line is strongly tilted and tipped over along one transverse direction, which may lead to different magnetic, optical, and transport properties compared with conventional nodal loops. To date, only K_4P_3 was theoretically predicted as a type-II NLS, but no candidate material has been experimentally reported.

This work investigates Mg_3Bi_2 , which is predicted as owning TSSs and is an ideal materials platform for studying type-II NLSs. From first principles calculations, Mg_3Bi_2 was predicted as a three-dimensional (3D) topological insulator with spin-orbit coupling (SOC) and a type-II NLS without SOC. A topology transition from 3D topological insulator to type-II NLS would be expected by tuning the strength of SOC effect. In this work, we have grown Mg_3Bi_2 films by molecular beam epitaxy (MBE) which allows us to control the thickness of Mg_3Bi_2 film layer by layer. In-situ reflection high energy electron diffraction (RHEED) and ex-situ X-ray diffraction (XRD) measurements were performed to confirm the high quality of Mg_3Bi_2 films. First principles calculations and in-situ angle resolved photoemission spectroscopy (ARPES) measurements were performed to study the band structure of Mg_3Bi_2 . The ARPES spectra are consistent with the first principles calculations, and this work confirmed that the natural surface of our films is type-I Mg-terminated. To further confirm the topology of its surface states, magneto-transport measurements were performed. This work observed clear 2D weak anti-localization (WAL) effect which is the hallmark of topological protected surface states. Therefore, This work has provided strong experimental evidences for the existence of TSSs in Mg_3Bi_2 film and paved the way to study type-II NLSs.

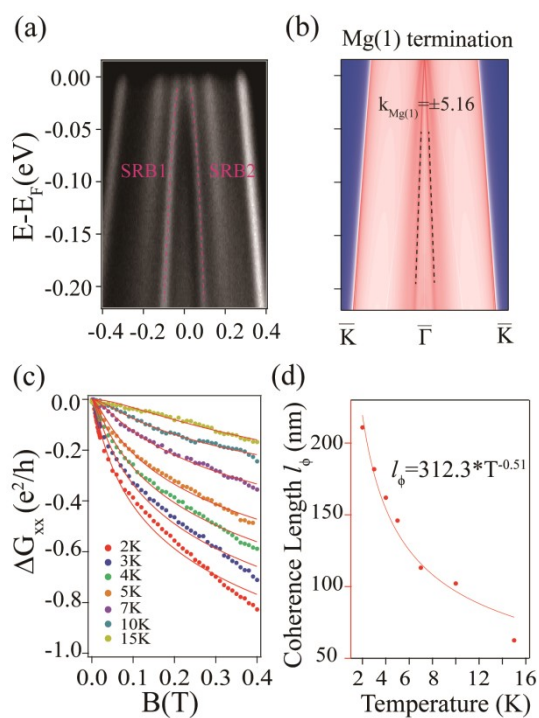


Figure 1 A pair of SRBs is clearly observed by in-situ ARPES. By comparing with the first principles calculations, we confirm that Mg_3Bi_2 film grown by MBE is Mg(1)-terminated and Mg_3Bi_2 film shows clear 2D weak anti-localization effects under low magnetic field, which is the hallmark of topological surface states.

Key words: Topological Surface State, Molecular Beam Epitaxy, ARPES, weak anti-localization

Acknowledgements: This work was supported by the Science Challenge Project (NO.TZ2016004), the Opening Foundation of State Key Laboratory of High Performance Computing (201601-02), the Foundation of President of CAEP (NO.201501040), the NSF of Hunan province (Grants No.2016JJ1021), the National Basic Research Program of China (NO.2015CB921303 and NO.2012YQ13012508), the General Program of Beijing Academy of Quantum Information Sciences(Project No.Y18G17), the Youth talent lifting project (Grant No. 17-JCJQ-QT-004).

G-P016

专题代号: G

Bi 调控二溴苊分子在 Ag(111)衬底上自组装结构

胡金平¹, 宋飞^{1*}

1 中国科学院上海应用物理研究所, 嘉罗公路 2019 号 (201800), 嘉定区, 上海, 中国

邮箱: hujinping@sinap.ac.cn

1* 中国科学院上海应用物理研究所, 嘉罗公路 2019 号(201800), 嘉定区, 上海, 中国,

邮箱: songfei@sinap.ac.cn

室温下, 二溴苊分子在 Ag(111)衬底既存在自组装结构也可以发生聚合反应, 聚合生成二聚体。二溴苊的常温自组装结构有两种, AAB 型和 AB 型。其中 AB 型自组装结构可以被 Bi 原子调控, Bi 可以调控分子之间的夹角并将分子之间吸附性的 Br 原子驱除。AAB 型的自组装结构是不受 Bi 原子调控, Bi 无法吸附在这种自组装结构上。二溴苊常温下脱溴聚合产生的二聚体除了可以并排排列, 还可以自组装形成六元环结构。新形成的六元环结构具有旋转手性结构, 相似地, Bi 原子也无法调控这种结构。上述讲的是蒸少量 Bi 的情况, 但是当 Bi 的量很大时, 自组装结构和六元环结构都消失了, 全部变成链状结构。

除了研究室温下分子在 Ag(111)衬底上的行为, 还研究了在不同温度下分子的行为。我们发现, 当退火至 45°C时, 自组装结构和六元环结构都被破坏, 全部转变成并排排列的二聚体结构。当退火温度升至 65°C, 分子聚合物变长, 开始出现五聚体等较长的链, 随着退火温度持续增加, 分子链的长度持续增加, 但当退火温度达到 300°C时, 分子链结构发生变化, 从分子-金属中间态转变成分子-分子共价耦合链, 最终这种分子-分子共价耦合链可以在 400°C稳定存在, 而且长度可以达到 60nm 左右。在分子聚合的整个过程中, Bi 原子都没有参与, 而且也不会阻碍分子链的生长, 但是在退火温度低于 100°C时, Bi 原子可以吸附在分子链的末端。

G-P017

专题代号: G

应力下锡酸锶外延薄膜的宽范围能带调控

高强, 李凯峰, 刘亲壮

淮北师范大学物理与电子信息学院, 淮北, 235000

Email: ggao523mail@163.com

摘要: 钙钛矿材料由于在光学、光伏和光电领域具有极好的物理和化学性质而显得特别重要。因此, 在器件应用方面, 材料的光学带隙是尤其关键的参数。在过去的几十年, 能带调控在设计新型功能的半导体材料和器件中被认为是强大的技术, 手段包括氧空位、掺杂、应力和超晶格等。特别是对于外延薄膜, 由于薄膜和衬底的晶格匹配性及热膨胀行为, 应力容易产生于界面处。众所周知, 应力因优化半导体材料的物理性质而被关注。如, 应力通过改变键的扭曲而影响载流子迁移率等输运性质; 通过引起电、磁轨道耦合而改变铁电、铁磁和超导材料的转变温度; 还可以直接改变键长和键角而改变钙钛矿材料的电子结构。对于钙钛矿结构的材料, 双轴压缩应变将导致其带隙变宽, 双轴拉伸应变将导致带隙变窄。

课题组团队利用脉冲激光沉积技术在铝酸镧(LaAlO_3 , 3.791Å)和氧化镁(MgO , 4.217Å)衬底上生长了锡酸锶(SrSnO_3 , 4.025Å)外延薄膜。由于薄膜和衬底的面内晶胞参数不同, 就会分别在 LaAlO_3 和 MgO 衬底上受到面内的压应力和张应力。X-射线衍射分析表明随着薄膜厚度的减小, 面内的压应力和张应力增大。光学透光测量表明, 薄膜的带隙随着压应力的增加从 4.44 增加到 5.59 eV, 并且有趣的是随着张应力的增加从 4.57 增加到 5.61 eV。X-射线光电子能谱测试揭示了在受到面内张应力时, 薄膜会产生大量的氧空位而使能带增加。结果表明这种大范围能带变化的 SrSnO_3 外延薄膜在光电器件应用中具有潜在的应用。

关键词: 锡酸锶 应力 能带调控

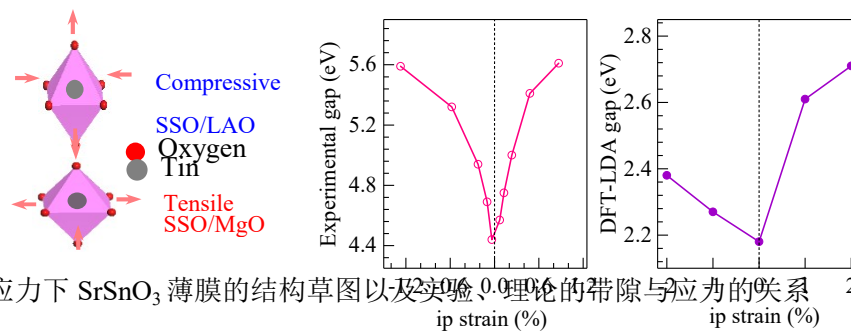


图 1 应力下 SrSnO_3 薄膜的结构草图以及实验、理论的带隙与应力的关系

参考文献

【1】D. J. Singh et al., Strain Effects on the Band Gap and Optical Properties of Perovskite SrSnO_3 and BaSnO_3 , *Appl. Phys. Lett.* **2014**, 104(1), 15.

基金项目：国家自然科学基金项目（NO.11374304, 11504120）等

G-P018

专题代号： G

AgNPs@ZnO:Ga 微米线的等离激元机理分析

万鹏、姜明明、阚彩侠

南京航空航天大学理学院，南京 211106

Email: wanp919@163.com

摘要：金属纳米结构表现出许多奇异的光学性质，比如局域电场增强效应、极大的光散射和光吸收、光热转换特性以及纳米天线效应等，使得其有望应用于生物医学探测、表面科学分析以及高性能光学/光电子器件等领域。目前关于金属纳米结构局域表面等离子体共振的研究主要集中激子-激子之间的近场耦合与共振增强，而对其从低阶共振（偶极子共振）到高阶共振（四极子共振等）过程的机制研究尚处于初级阶段。我们通过调控 Ag 纳米薄膜的溅射时间，实现银纳米颗粒(AgNPs)尺寸的调控（直径 d 在[50nm, 250nm]范围的可调），实现 AgNPs 的偶极子共振向四极子共振的转变：四极子共振从无到有，从弱到强，并最终主导表面等离激元共振吸收峰。同样的制备方法，单根 ZnO:Ga 微米线上通过类似的实验条件实现了微米线表面银纳米颗粒尺寸的调控，并基于单根 AgNPs@ZnO:Ga 微米线进行光泵浦测试。光泵浦激光的实验结果表明，基于 AgNPs 的四极子共振诱导的热电子注入可以有效降低单根微米线光泵浦激光的阈值、实现激光输出的增强；并且随着激发功率的增加，激光峰位产生了显著的红移，同时伴随着激射峰半高宽以及模间距出现明显的展宽现象。因此基于大尺寸 AgNPs 包裹单根 ZnO:Ga 微米线实现了飞秒激光激发下的 electron-hole-plasma 激射现象。这种 EHP 激射现象来自于 AgNPs 的四极子共振有效激发所诱导的热电子的产生、再注入至微米线中，形成 ZnO:Ga 导带的填充所致。该实验结果为后续在 AgNPs 四极子共振增强宽禁带半导体光电器件提供了理论与实验依据。

- 参考文献： [1] Jiang. M. M et al., Hybrid quadrupolar resonances stimulated at short wavelengths using coupled plasmonic silver nanoparticle aggregation, Journal of Materials Chemistry C, 2013, 2(1): 56-63.
- [2] Xu. Chun. xiang et al., Plasmon-enhanced ZnO whispering-gallery mode lasing. Nano Research,

2018, 11, 3050.

基金项目：国家自然科学基金项目(No.11574307, U1604263, 11774171, 21805137, 11874220); 江苏省高等学校重点学科建设项目(KYZZ16-0164).

G-P019

专题代号： G

新型二维材料中温度-应变的耦合效应

陆冬林、祁祥、钟建新

温度和应变效应以已经广泛用来调控材料的物性,然而单一的调控手段无法更多的实现材料的实际应用。因此,温度-应变耦合机制已经被引入去调控相变、超导性、电荷密度波和磁性等(Phys. Rev. B, 2012, 85, 020101; Nat. Mater., 2013,12, 634-640; Phys. Rev. B, 2008, 78, 035129; ACS Nano 2012, 6, 1695-1701)。我们将 Sb 薄膜制备到 PDMS 上,利用拉曼光谱仪研究了 Sb 薄膜和 PDMS 界面具有很强的温度-应变耦合作用,这样的耦合效应对 Sb 的声子频率产生了有效的调控。基于这样的思想,我们发现,在二维材料制备过程中也存在很强的温度-应变耦合效应,尤其是对于 MoTe₂、SnSe/SnSe₂ 这类容易发生相变的材料来说,有效的调控温度-应变耦合效应,可实现单相 MoTe₂、SnSe/SnSe₂ 的制备。

G-P020

专题代号： G

TiC 负载铂单层一氧化碳氧化和水煤气转化的 DFT 研究

王雁、杨宗献

河南师范大学物理学院, 新乡 453007

Email: yanwang229@163.com

摘要: 一氧化碳(CO) 氧化和水煤气转化(WGS)反应可以有效去除燃料电池中的所产生的 CO 有毒气体,也可以作为理解多相催化和探索催化活性的基础反应。在过去的几十年中,大量

的试验和理论研究已广泛开展在过渡金属表面 (如: Pt、Pd 等), 以及金属纳米颗粒沉积在氧化物载体上 (如: TiO₂、CeO₂ 等)。尤其是, Haruta 等发现 Au 团簇沉积在过渡金属氧化物上在低温环境下表现出高性能的催化活性之后, 更多的研究集中在负载金属催化剂上 CO 氧化和 WGS 反应的研究。然而, 负载型催化剂的活性与载体的性质和金属颗粒的尺寸或形状密切相关。因此, 在探索高性能的催化剂中, 选择合适的载体以及理解金属和载体之间相互作用已成为一个关键问题。

在本工作中, 我们用经验色散修正的密度泛函理论探索了 TiC(001)负载 Pt 单层上 CO 氧化【1】和 WGS 反应【2】的催化性能。我们的研究发现 Pt_{ML}/TiC(001)相比于 Pt(111), 在费米能级附近的 5d 态密度明显降低, 单层 Pt 原子与 TiC(001)表面接触时产生强的电子扰动和相互作用, 从而改善或提高负载 Pt 原子的催化活性。我们详细揭示了 Pt_{ML}/TiC(001)表面上可能发生的 CO 氧化和 WGS 反应机理, 指出各反应所主导的反应路径和影响其催化活性的关键因素。本研究表明 TiC(001)负载 Pt 单层可以作为 CO 氧化和 WGS 反应的良好催化剂。

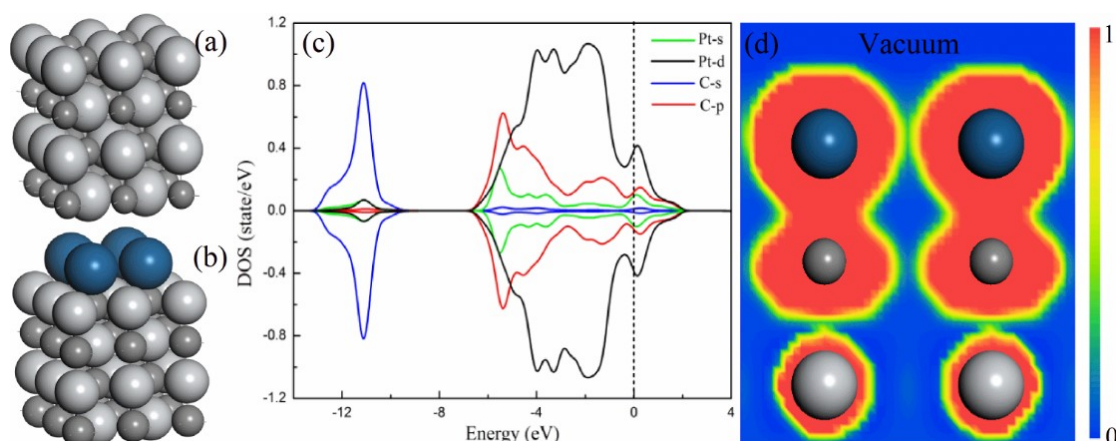


图 1 TiC(001) (a)和 Pt_{ML}/TiC(001) (b)几何模型的侧视图, (c)和(d)分别为 Pt_{ML}/TiC(001)的态密度(PDOS)和电子局域函数(ELF)图。

关键词: TiC Pt 单层 一氧化碳氧化 水煤气转化 密度泛函理论

参考文献

- 【1】 Y. Wang et al., TiC and TiN supported platinum monolayer as high-performance catalysts for CO oxidation: A DFT study, *J. Chem. Phys.* 2018, 149, 054705.
- 【2】 Y. Wang et al., An electronic perturbation in TiC supported platinum monolayer catalyst for enhancing water-gas shift performance: DFT study, *J. Phys. Condens. Matter.* 2019, 31, 305201.

基金项目：国家自然科学基金项目 (NOs. 11874141, U1804130, 11474086)。

G-P021

专题代号： G

二维碳化铌单晶网络状超导薄膜的输运研究

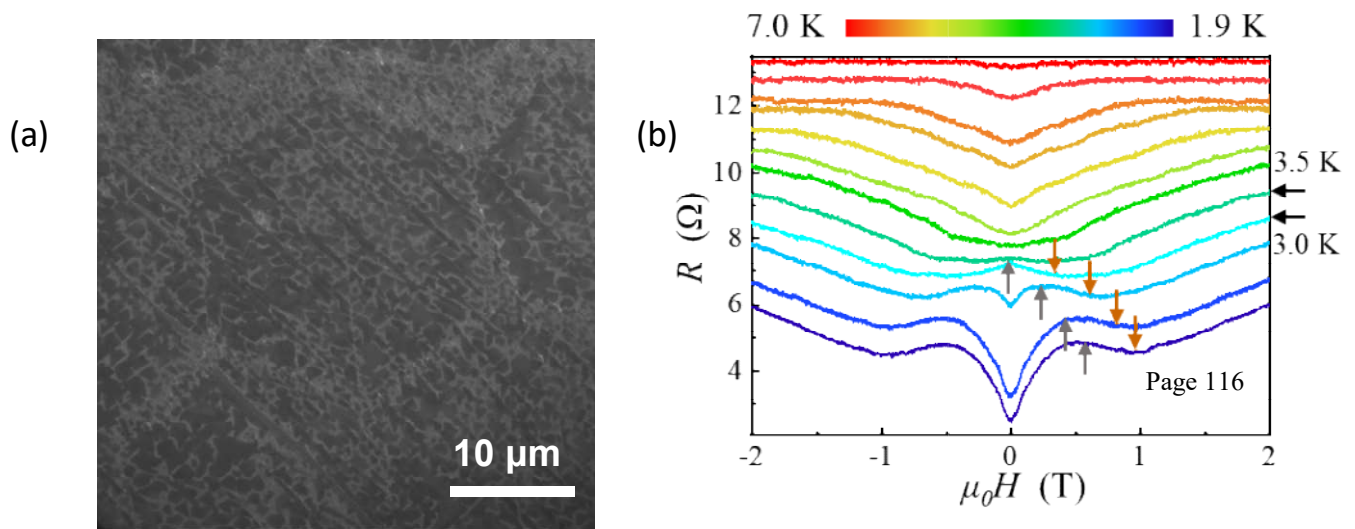
郝蒙、徐川、刘震、任文才、康宁

北京大学信息科学技术学院,北京 100871

Email:mhao_phy@pku.edu.cn

摘要：近年来，随着材料制备手段和表征技术的不断提高，各种低维材料层出不穷。以石墨烯为首的二维材料的兴起，探寻其它性能出众的新型二维原子晶体材料一直是该领域的热点话题。过渡金属碳化物作为材料领域的一大家族，一方面因为结合了金属和陶瓷的特性，故具有很高的硬度和强度，良好的热稳定性和抗腐蚀性。另外，部分的过渡金属碳化物也具有超导特性，比如 Mo_2C ^[1], TaC, NbC 等。

本工作首次以化学气相沉积 (CVD) 方法生长出独特的二维碳化铌单晶网络纳米结构，并以此为体系，结合微纳加工技术，对其低温输运的行为和机理进行了深入的研究。这种高质量的 NbC 二维晶体网络在低温下呈现出了非同寻常的两次超导转变。并且随着施加磁场的增大，两次超导转变表现出了不同的演化趋势。类似的超导的“再进入”现象在以往的研究中主要出现在一些非晶态或者颗粒状超导薄膜的体系中^[2]。结合二维碳化铌网络这种独特的纳米结构以及对于体系电输运的研究，我们认为其在不同的温度区间蕴含着不同的超导转变机制。经历了第一次的在较高温度出现的碳化铌单晶的局部超导转变之后，随着温度的降低，碳化铌单晶逐渐形成超导岛，以准粒子隧穿形式为主要的输运行为，温度进一步降低，单晶碳化铌之间通过约瑟夫森耦合形成全局的超导相干，故出现了第二次超导转变。后续对



于体系磁运输的研究也进一步揭示了这种独特的网络纳米结构的磁通动力学特点。本工作对于进一步理解二维超导材料体系的内在本质和机理提供了新的研究视角,也为未来低维超导电子器件的应用打下了基础。

关键词: 碳化铌 二维超导约瑟夫森耦合 磁运输

参考文献

- [1] Xu, Chuan, et al., Large-area high-quality 2D ultrathin Mo₂C superconducting crystals. Nature materials 2015, 14(11), 1135
- [2] Barber Jr, Richard P., et al., Negative magnetoresistance, negative electroresistance, and metallic behavior on the insulating side of the two-dimensional superconductor-insulator transition in granular Pb films. Physical Review B 2006, 73(13), 134516

G-P022

专题代号: G

VO₂ 表面结构及其金属-绝缘体转变机制原子尺度研究

曹瑞琦, 陈陆枫, 李磊, MuhammadAsif, 陆浩, 黎明锴, 李派, 卢

寅梅,

何云斌*

湖北大学材料科学与工程学院, 武汉, 430062

Email:ybhe@hubu.edu.cn

摘要: 二氧化钒是一种典型的强关联材料, 在 340K 附近发生金属-绝缘体转变 (MIT), 并伴随着金红石相 (R 相) 到单斜相 (M1 相) 的晶体结构转变, 同时, 其电学、光学性质也会发生突变, 其电阻突变量级最高可达 10^5 , 对红外光的透过和吸收也有很大程度的改变。因其相变温度接近室温, VO₂ 可广泛应用于智能窗、记忆存储器、光电开关和红外探测器[1]。本工作利用超高真空扫描隧道显微镜 (STM)、扫描隧道谱 (STS)、低能电子衍射 (LEED) 和 X 射线光电子能谱 (XPS), 对生长在 TiO₂ (110) 衬底上的纯相 VO₂ 外延膜的 MIT 行为

在原子分辨尺度进行了研究，分别得到了 VO₂ 外延膜在 MIT 相变前后表面原子结构及其电子结构。低温时，VO₂ 外延膜表面呈单斜结构，高温时，VO₂ 外延膜表面呈四方结构。通过 STS 测试，我们首次在实验上获得了在费米能级附近 VO₂ 的精细电子能带结构，与现有的第一性原理计算以及晶体场理论结果完全吻合。对于低温绝缘相，测得其电学带隙~0.6 eV；在高温金属相，测得其带隙消失。我们通过 STM/STS 技术首次在原子尺度上同时实验观察到了 VO₂ 表面晶体结构和电子结构的转变，为进一步理解 VO₂ 金属-绝缘体相变机制提供了第一手数据，进一步可为以 VO₂ 材料为基础的半导体器件研发提供理论指导[2]。

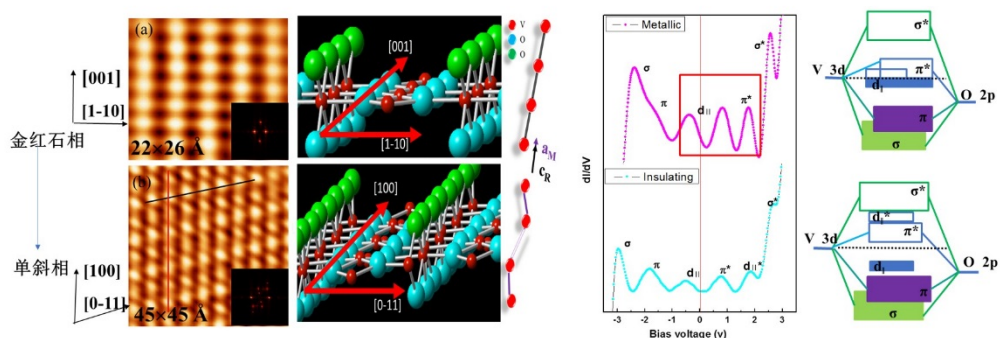


图 1 a 金红石相 (R 相) 和 b 单斜相 (M1 相) VO₂ 表面 STM 图及其模型与对应 STS

关键词：VO₂ 外延膜, MIT 相变机制, STM, STS

参考文献

1. Lee, D et al., Isostructural metal-insulator transition in VO₂, Science, 2018, 362 (6418), 1037.
2. Cao, RuiQi, He, Yunbin, et al.,To submit.

基金项目：国家自然科学基金 (项目编号： 51572073, 11574074, 11774082, 61874040), 湖北省自然科学基金 (项目编号： 2016AAA031, 2018CFB700)

G-P023

专题代号： G

C₆₀ 分子在单层硒化铜表面自组装行为的研究

杨孝天^a、郝振亮^a、王兴悦^a、卢建臣^{a*}、蔡金明^{a*}

^a 昆明理工大学材料科学与工程学院, 昆明 650000

Email: lu.jianchen1989@gmail.com; j.cai@kmust.edu.cn

石墨烯的成功激励人们探索其他类石墨烯二维原子晶体材料，截止到目前，科研工作者已经成功地制备十几种单层二维原子晶体材料。这些二维材料有着各种各样的电学性质（金属、半金属、半导体和绝缘体），也呈现了很多优异的物理特性（超导，热电效应，电荷密度波等），使其在很多方面有巨大的应用前景（自旋电子学，光电子学，化学和生物传感器，超级电容，太阳能电池和锂离子电池等）¹⁻²。

单层二维原子晶体材料从组成成分上可以分为单元素二维材料（石墨烯，硅烯，锗烯，锡烯，铅烯，硼烯，锑烯，黑磷）和双元素二维材料（六方氮化硼，过渡金属二硫属化合物）。与单元素二维原子晶体材料相比，双元素二维材料由于其可能组成的元素种类较多，所以其会呈现更为复杂的组成结构以及更为丰富的物理特性。然而，截止到目前，单层双元素二维原子晶体材料的种类较少。因此，为了进一步扩充二维原子晶体材料库并探索其的潜在物性。我们通过精确地调控实验参数和优化实验过程，制备了单层双元素二维过渡金属硫族化合物材料（单层硒化铜薄膜），并发展了一种构建纳米级精准规则图案的方法，成功地构筑了一种基于过渡金属硫族化合物的“纳尺度的自然图案”材料，如图 1 所示。单层硒化铜二维材料表面具有周期排列三角形孔洞结构，孔洞周期为 3 nm，孔洞大小为边长 1 nm 的等边三角形。

富勒烯分子自发现以来，由于其独特的球形结构和优异的化学物理性质，富勒烯已成为近几十年来研究最多的分子之一。富勒烯及其衍生物的自组装及性质研究已经成为研究热点之一。C₆₀ 分子是富勒烯家族中重要的成员，是由 60 个碳原子构成的分子，由 12 个正五边形，20 个正六边形组成，形似足球，又名足球烯。C₆₀ 作为一种新型的碳材料具有独特的理化性质。此外，在其他结构或材料中引入 C₆₀ 及其衍生物可使其物理、化学性质和性能得到较大改善，表现出独特的光电学、材料科学和生物医学等性能。球形富勒烯具有很强的电子可接受性，可以用超分子自组装方法制备功能化富勒烯聚集体，在生物学、化学和材料科学领域具有重要的应用价值³⁻⁵。因此，发展 C₆₀ 及其衍生物材料在应用研究方面是一项富有挑战性的科研工作⁶⁻¹⁰。

C₆₀ 分子具有 Ih 对称性，是所有已知分子中对称性最好的 C₆₀ 中六元环的每个 C 原子与其它 C 原子的双键结合成类似苯环的结构。但是 C₆₀ 的笼状分子结构使其 C-C 键既具有 SP² 杂化特征又具有 SP³ 杂化成分形成了独特的 SP^{2.28} 杂化，这种结构导致分子中电子的离域程度不高削弱了分子的芳香性，相应地具有类似烯烃定域双键的特性且具有较强的亲电子能力，故 C₆₀ 分子的基本化学性质为类似于缺电子烯烃可作为电子受体 C₆₀ 分子具有一定的反应活性可进行多种化学反应¹¹⁻¹⁵

在世界前沿领域中被研究最多的两类材料：二维原子晶体材料和 C60 分子，如何将二者有机地结合起来，尤其是单层二维材料和单个 C60 分子阵列和 C60 分子/硒化铜二维材料异质结结构，发挥各自的优势，集成各自的特点，构筑具有强大功能和特殊用途的二维材料（图 4），是一个值得系统和深入研究的科学问题。然而，由于有效的制备方法缺乏，可用的二维材料不足，所以，目前相关研究报道较少。因此我们以最新制备出来的、世界首个具有自然图案化的硒化铜二维原子晶体材料为出发点，制备 C60 分子/硒化铜二维材料异质结材料。以单层硒化铜薄膜表面具有周期为 3 nm 的三角形孔洞结构为空间位置限制的模板，通过在其表面选择性沉积 C60 分子，制备 C60 分子/硒化铜二维材料异质结结构。本文中，我们通过分子束外延(Molecular Beam Epitaxy, MBE)技术在 Cu(111)上制备出大面积单 CuSe 规则孔洞，之后将 C₆₀ 分子沉积在单层 CuSe 表面，利用超高真空扫描隧道显微镜(Ultrahigh Vacuum Scanning Tunneling microscopy, UHV-STM)对 CuSe-C₆₀ 结构进行表征。首先将 Se 原子沉积在 120°C 条件下沉积 Cu(111)基底，基底保持在室温条件下，然后 300 °C退火，再将做好的 CuSe 保持室温，在 300 °C条件下沉积 C₆₀ 分子 3min。本研究通过超分子相互作用形成有序纳米结构,可以加深对富勒烯本体的理解,促进富勒烯功能材料在各个领域的应用。

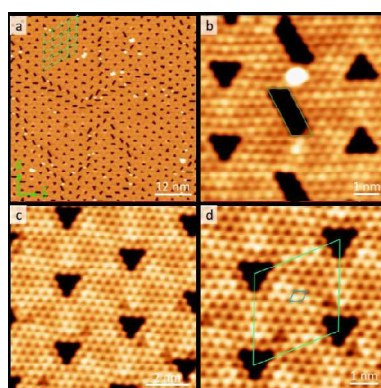


图 1 规则孔洞 CuSe 材料

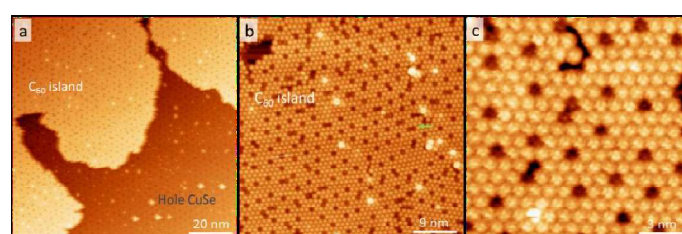


图 2 CuSe-C₆₀ 材料

关键词：CuSe;C₆₀;二维材料;可控制备;STM

参考文献（中文小五号宋体，其中英文和数字为 Times New Roman 小五号字）

1. Lin, X., et al., Intrinsically Patterned Two-Dimensional Materials for Selective Adsorption of Molecules and Nanoclusters. *Nat Mater* **2017**, 16, 717-721.
2. Gao, L., et al., Epitaxial Growth of Honeycomb Monolayer Cuse with Dirac Nodal Line Fermions. *Adv. Mater.* **2018**, 30, 7.
3. Williams, R. M.; W.Verhoeven, J., Supramolecular Encapsulation of C60 in a Water Soluble Calixarene; a Core-Shell Charge Transfer Complex. *Recueil des Travaux Chimiques des Pays-Bas* **1992**.
4. Zhang, , K. H. L.; Hui Li, H. M.; Han Huang; Ma, , J.; Wee, , A. T. S.; Wei Chen, Control of Two-Dimensional Ordering of F16cupc on Biag(111) Effect of Interfacial Interactions. *J. Phys. Chem. C* **2010**.
5. Cottin, M. C.; Lobo-Checa, J.; Schaffert, J.; Bobisch, C. A.; Möller, R.; Ortega, J. E.; Walter, A. L., A Chemically Inert Rashba Split Interface Electronic Structure of C60, Feop and Ptda on Biag2/Ag(111) Substrates. *New Journal of Physics* **2014**, 16, 045002.
6. Zhu, F. F.; Chen, W. J.; Xu, Y.; Gao, C. L.; Guan, D. D.; Liu, C. H.; Qian, D.; Zhang, S. C.; Jia, J. F., Epitaxial Growth of Two-Dimensional Stanene. *Nature Materials* **2015**, 14, 1020-1025.
7. Xu, X.; Yao, W.; Xiao, D.; Heinz, T. F., Spin and Pseudospins in Layered Transition Metal Dichalcogenides. *Nature Physics* **2014**, 10, 343-350.
8. Franke, K. J.; Schulze, G.; Pascual, J. I., Excitation of Jahn–Teller Active Modes During Electron Transport through Single C60 Molecules on Metal Surfaces. *The Journal of Physical Chemistry Letters* **2009**, 1, 500-504.
9. Uemura, S.; Taniguchi, I.; Sakata, M.; Kunitake, M., Electrochemical Stm Investigation of C70, C60/C70 Mixed Fullerene and Hydrogenated Fullerene Adlayers on Au(111) Prepared Using the Electrochemical Replacement Method. *Journal of Electroanalytical Chemistry* **2008**, 623, 1-7.
10. Guo, S.; Nagel, P. M.; Deering, A. L.; Van Lue, S. M.; Alex Kandel, S., Scanning Tunneling Microscopy of Surface-Adsorbed Fullerenes: C60, C70, and C84. *Surface Science* **2007**, 601, 994-1000.
11. Hirsch, A., The Chemistry of the Fullerenes an Overview. *Angew. Chem. int. Ed. Engl.* **1993**.
12. Wudl, F., The Chemical Properties of Buckminsterfullerene (C60) and the Birth and Infancy of Fullerooids. *Acc. Chem. Res.* **1992**.

13. Roger Taylor; Walton, D. R. M., The Chemistry of Fullerenes. Nature Publishing Group **1993**.
14. Tsuei, K.-D.; Yuh, J.-Y.; Tzeng, C.-T.; Chu, R.-Y.; Tsang, S.-C. C. a. K.-L., Photoemission and Photoabsorption Study of C₆₀ Adsorption on Cu(111) Surfaces. Physical Review B **1997**.
15. Xu, J.; Liu, W.; Geng, Y.; Deng, K.; Zhan, C.; Zeng, Q., An STM/STS Study of Site-Selective Adsorption of C₇₀ Molecules onto Arc-Shaped Bodipy Molecular-Networks. Nanoscale **2017**, 9, 2579-2584.

基金项目：昆明理工大学高层次人才（No.132314119425）；

G-P024

专题代号： G

N=7 扶手椅型石墨烯纳米带阵列的拉曼研究

许望伟^a、朱嘉森^b、郝振亮^a、陈建^{b*}、蔡金明^{a*}

^a 昆明理工大学材料科学与工程学院，昆明 650000

^b 中山大学材料科学与工程学院，广州 510275

Email: <mailto:puscj@mail.sysu.edu.cn>; j.cai@kmust.edu.cn

制备石墨烯纳米带作为打开石墨烯带隙的一种方式，其能带结构与石墨烯纳米带的边缘、宽度、掺杂、修饰等密切相关。2010年，蔡金明发表的文章中提出“自下而上”法，为精确制备石墨烯纳米带提供了一种良好的制备方式¹。“自下而上”法指前驱体分子成链，之后脱氢环化制备石墨烯纳米带的一种方式^{2,3}。通过控制前驱体分子的结构，反应选择性等，能够精确控制合成石墨烯纳米带的边缘结构，宽度，掺杂等，达到精确调控石墨烯纳米带能带结构的目的⁴⁻⁶。

由于石墨烯纳米带是一维材料，用石墨烯纳米带制作器件时，如果能够将纳米带制备成单一生长方向的阵列会非常有益。之前有研究采用机械剥离的方式来制备石墨烯纳米带阵列，但是这样的纳米带边缘宽度等无法精确调控⁷。我们使用“自下而上”法，在 Au (11 11 12) 面生长 N=7 石墨烯纳米带，利用基底固定取向的台阶面作为模板，成功制备沿 [1 -1 0] 晶向的石墨烯纳米带阵列。

拉曼光谱是一种非常有效的表征方式，在材料研究领域受到广泛应用。拉曼光谱对表征石墨烯发挥了重要作用⁸⁻¹²，也成为理解石墨烯中电子和声子的行为的强大工具¹³⁻¹⁵。材料

的拉曼光谱和其结构密切相关，当表征高度各项异性材料时，拉曼光谱会出现偏振性。对于石墨烯纳米带阵列而言，可以视为高度各向异性材料，其拉曼光谱也会出现偏振效应¹⁶。当入射激光线偏振方向与纳米带阵列方向一致时，其拉曼信号达到最强，此时拉曼光谱中可以观察到一些弱峰。这些弱峰的振动模式可能是石墨烯纳米带的边缘所激发，研究这些振动模式能进一步了解材料边缘结构对拉曼禁止模的激活作用^{17,18}。

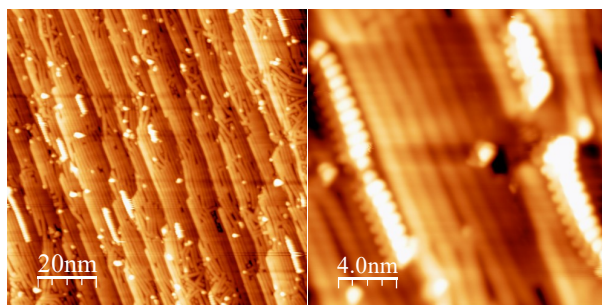


图 1 Au (11 11 12) 上的石墨烯纳米带阵列

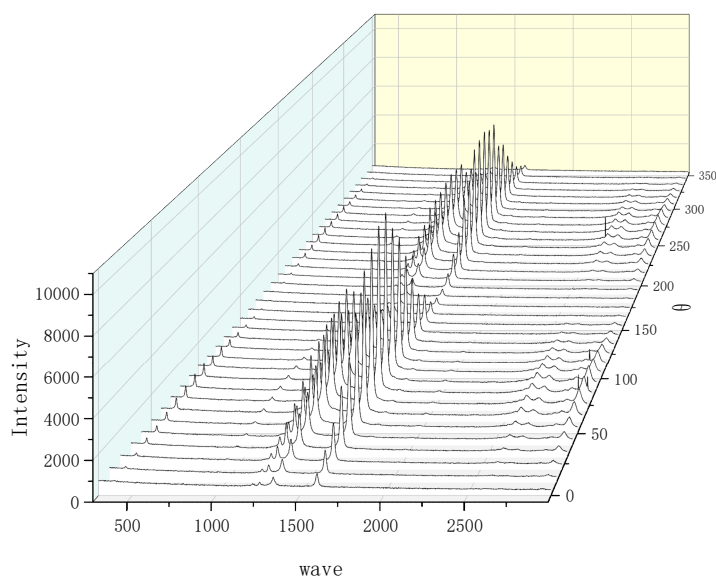


图 2 具有偏振现象的拉曼光谱。 $\theta=90^\circ$ 时，激光线偏振方向平行于纳米带阵列

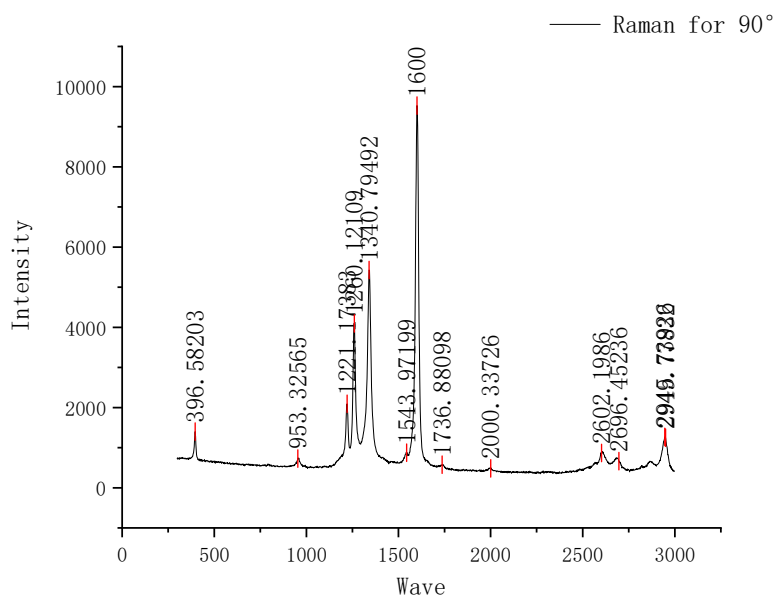


图 2 激光线偏振方向平行于纳米带阵列时，纳米带的拉曼光谱

关键词：石墨烯纳米带;可控制备;STM;拉曼

参考文献（中文小五号宋体，其中英文和数字为 Times New Roman 小五号字）

1. J. Cai, P. Ruffieux¹, R. Jaafar, M. Bieri, T. Braun, S. Blankenburg, M. Muoth, A. P. Seitsonen, M. Saleh, X. Feng, K. Müllen & R. Fasel *Nature*. 466,(2010) 470
2. P. Ruffieux, J. Cai, N. C. Plumb, L. Patthey, D. Prezzi, A. Ferretti, E. Molinari, X. Feng, K. Müllen, C. A. Pignedoli, and R. Fasel, *ACS NANO* 6 (2012) 6930
3. K. Sun, P. Ji, J. Zhang, J. Wang, X. Li, X. Xu, H. Zhang, and L. Chi, *Small*, (2018), 1804526
4. Z. Pedramrazi, C. Chen, F. Zhao, T. Cao, G. D. Nguyen et al. *Nano Letters* 18, 6,(2018) 3550
5. X. Su, Z. Xue, . Li, and P. Yu, *Nano Letters* 18, 9, (2018) 5744
6. E. Carbonell-Sanromà, J. Hieulle, M. Vilas-Varela et al. *ACS Nano* 11,7, (2017) 7355
7. B. Terres ´, S. Reichardt¹, C. Neumann et al. **Phys. Status Solidi B**251, 12, (2014) 2551
8. P. Lespade, R. Al-Jishi, M.S. Dresselhaus, *Carbon* 20 (1982) 427
9. A.C. Ferrari, J. Robertson, *Phys. Rev. B* 61 (2000) 14095
10. M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, R. Saito, A. Jorio, *Phys. Rep.* 409 (2005) 47
11. L.G. Cançado, M.A. Pimenta, R.A. Neves, G. Medeiros-Ribeiro, T. Enoki, Y. Kobayashi, K. Takai, K.

- Fukui, M.S. Dresselhaus, R. Saito, A. Jorio, Phys. Rev.Lett. 93 (2004) 047403
12. M.A. Pimenta, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, L.G. Cançado, A. Jorio, R. Saito, Phys. Chem. Chem. Phys. 9 (2007) 1276
 13. A.C. Ferrari, J.C. Meyer, V. Scardaci, C. Casiraghi, M. Lazzeri, M. Mauri, S. Piscanec, Da Jiang, K.S. Novoselov, S. Roth, A.K. Geim, Phys. Rev. Lett. 97(2006) 187401
 14. J.-C. Charlier, P.C. Eklund, J. Zhu, A.C. Ferrari, in: Ado Jorio, M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus (Eds.), Springer-Verlag, Berlin, 2007, pp. 673
 15. L.Martini, Z. Chen , N. Mishra , G. B. Barin ,P. Fantuzzi, P. Ruffieux , R. Fasel et al. Carbon 146 (2019) 36
 16. G. Luo, L. Wang, H. Li, R. Qin, J. Zhou, L. Li, Z.Gao, W. Mei, Jing Lu, and S. Nagase, J. Phys. Chem. C, 115, (2011) 24463
 17. Y. Guo, W. Zhang, H. Wu, J. Han, Y. Zhang, S.g Lin, C. Liu, K. Xu, J.i Qiao, W. Ji, Q. Chen, S. Gao, W. Zhang, X. Zhang, Y. Chai, Sci. Adv. 4, eaau6252 (2018)
 18. **Roland Gillen, Marcel Moh2, and Janina Maultzsch, Phys. Status Solidi B 247, Nos. 11–12, 2941 (2010)**

G-P025

专题代号： G

金纳米棒修饰单根氧化锌微米线异质结二极管

刘洋、姜明明*、阚彩侠*

南京航空航天大学理学院，江苏 南京 211106

Email:yangliuedcba@nuaa.edu.cn

摘要：发光二极管（LED）技术近几十年来取得了重大进展，广泛应用于通信、显示、照明等领域。但由于半导体材料固有属性和制作技术方面的限定，LED 的发光效率和性能仍有巨大的提升空间。由于金纳米棒纵横比可调，且具有良好的场限域性和场增强特性，在高性能半导体光电子器件领域得到广泛应用，有效改善和提高光电器件的性能和指标参数。在本实验中，我们采用 p 型硅（p-Si）作为衬底，基于单根氧化锌（ZnO）微米线构筑异质结 LED。p-Si 作为一种间接带隙半导体，电子在跃迁过程中会以声子的形式释放一部分能量，以其构

筑的异质结 LED 发光效率比较低。为了提高其发光强度，采用与单根微米线异质结 LED 发光波长相匹配的金纳米棒（AuNRs），将其旋涂在单根微米线上，形成了复合结构（AuNRs@ZnO），并结合 p-Si 衬底构筑单根 AuNRs@ZnO 微米线异质结 LED。将其与未旋涂 AuNRs 的异质结发光二极管对比，显著提高了峰位在 675nm 左右的红光强度。本实验通过特定 AuNRs 的引入，在显著提高单根微米线载流子有效注入的同时，实现了表面等离子体激元共振增强的单根微米线异质结 LED。

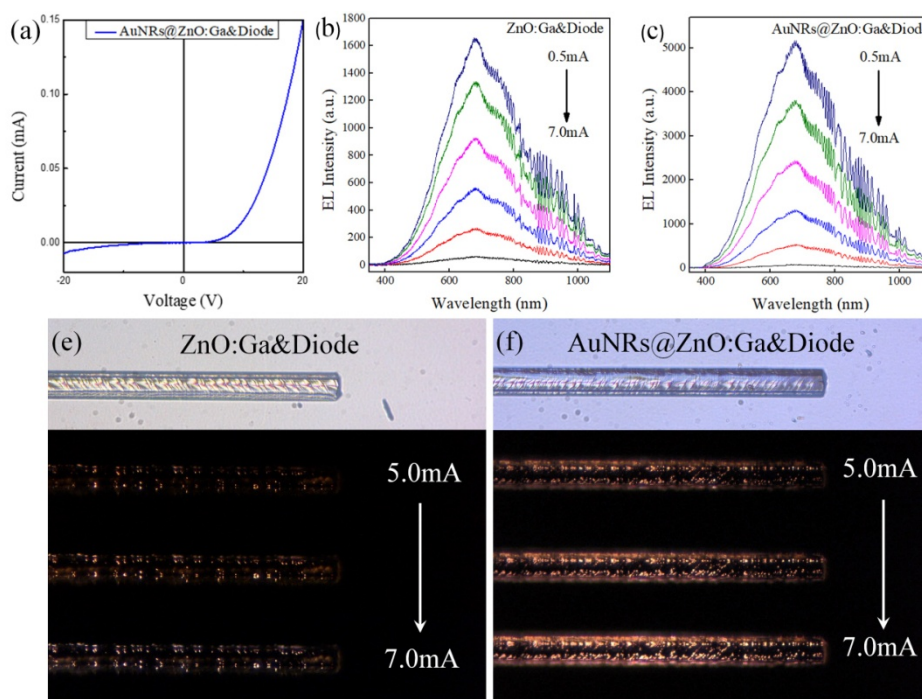


图 1 (a)I-V 曲线. (b)ZnO:Ga&DiodeEL 光谱. (c)AuNRs@ZnO:Ga&Diode 光谱.

(d)ZnO:Ga&Diode 发光图. (f)AuNRs@ZnO:Ga&Diode 发光图.

关键词：金纳米棒 表面等离子体共振 高效发光二极管

基金项目：国家自然科学基金项目(No.11574307, U1604263, 11774171, 21805137, 11874220)

G-P026

专题代号： G

1T/2H-VS₂ 垂直异质结构的磁性和电子性质

靳丹

河北师范大学物理学院，石家庄 050000

Email: danjin546326@163.com

摘要:单层的二硫化钒(VS_2)被认为是最重要的过渡金属双硫化合物(TMDs)之一,其固有的磁性和潜在的自旋电子应用引起了人们的广泛关注。^{[1]-[3]}单层 TMDs 有两种相:三棱柱形,记为 2H 相和八面体配位,记为 1T 相。有研究表明,单层 VS_2 的 1T 相是金属性质,2H 相是半导体性质,而且 1T 相和 2H 相在应变和温度的条件下会发生相稳定性的转变。^[4]在本文中,我们利用第一性原理计算,研究了由单层 VS_2 的 1T 相和 2H 相组成的垂直异质结构的结构、磁性和电子性质,并考虑了应变和空位对其电子性质的影响。

VS_2 垂直异质结构的稳定性介于 2H 和 1T 相之间,表明它可能是 VS_2 单层的中间态。基于 GGA+U 和 HSE 的计算,具有铁磁性质的 VS_2 异质结构体系显示出金属性质,磁矩为 $0.34\mu_B/\text{atom}$ 。然而,引入应变或空位后,体系的电子性质发生显著改变。在 1%的压应变或 8%的拉应变条件下,金属性质的 VS_2 异质结构转变为半金属性质。而且包含 S 空位的 VS_2 异质结构,其电子性质也从金属转变为了半金属。因此,利用 VS_2 单分子层的异质结构可以开发一些新的自旋电子器件。

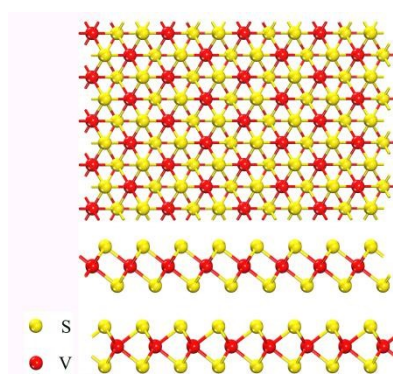


图 1. 1T/2H- VS_2 垂直异质结构

关键词: 二维材料、垂直异质结构、磁性、电子性质、第一性原理计算

【1】H. L. Zhuang and R. G. Hennig, Stability and magnetism of strongly correlated single-layer VS_2 . Phys. Rev. B, 2016, 93, 054429.

【2】Y. Ma, Y. Dai, M. Guo, C. Niu, Y. Zhu, and B. Huang, Evidence of the Existence of Magnetism in Pristine VX_2 Monolayers ($X = \text{S}, \text{Se}$) and Their Strain-Induced Tunable Magnetic Properties. ACS Nano 2012, 6, 1695-1701.

【3】E. B. Isaacs and C. A. Marianetti, Electronic correlations in monolayer VS_2 . Phys. Rev. B 2016, 94, 035120.

【4】M. Kan, B. Wang, Y. H. Lee, and Q. Sun, A density functional theory study of the tunable structure,

magnetism and metal-insulator phase transition in VS₂ monolayers induced by in-plane biaxial strain. Nano Res 2015, 8, 1348-1356.

G-P027

专题代号: G

Experimental evidence of the thickness- and electric-field-dependent topological phase transitions in topological crystalline insulator SnTe(111) thin films

龚演, 朱科静, 李哲, 臧运祎, 冯硝, 张定, 宋灿立, 王立莉, 李渭, 陈曦, 马旭村, 薛其坤, 徐勇, 何珂

Using in situ angle-resolved photoemission spectroscopy, we systematically studied molecular-beam-epitaxy-grown topological crystalline insulator SnTe(111) thin films with varied thicknesses and substrate conditions. An oscillation in the band gap size with an increase in thickness was observed to depend on the electric field perpendicular to the films. The observations are consistent with the theoretically predicted thickness- and electric-field-dependent topological phase transitions between the normal insulator and the quantum spin Hall insulator phases in SnTe(111) films and demonstrate them to be an excellent and electrically tunable quantum spin Hall system.

G-P028

专题代号: G

Electrochemical properties of 3D NiCo₂O₄ nanoflowers

Zhipeng Mao^A; Yu Tian^A; Guang Zheng^A

A) School of Physics and Information Engineering, Key Laboratory of Optoelectronic Chemical Materials and Devices of Ministry of

Education, Jianghan
University, Wuhan 430056, China

Three-dimensional(3D) NiCo₂O₄ nanoflowers have been directly grown on a foamed nickel substrate surface, using a hydrothermal method. The deposited thin films were characterized for their structural, morphological and electrochemical properties by using XRD, SEM, cyclic voltammetry and Chrono Potentiometry methods. The 3D NiCo₂O₄ nanoflowers were used as working electrode to measure the supercapacitor performance. The 3D NiCo₂O₄ nanoflowers exhibit high specific capacitance of 1460 Fg⁻¹ at current density 1 Ag⁻¹. The capacitance was 74.6% after 1000 cycles at a current of 10 mA. This shows a good cycle stability and high rate capability of 3D NiCo₂O₄ nanoflowers. From this investigation it can be concluded that the low cost and environmental friendly hydrothermal method could be used to deposit efficient 3D NiCo₂O₄ nanoflowers for supercapacitor application.

References

1. Kim H, Cho J. Hard templating synthesis of mesoporous and nanowire SnO₂ lithium battery anode materials [J]. *Journal of Materials Chemistry*, 2008, 18 (7): 771.
2. Li D, Qin Q, Duan X, Yang J, Guo W, Zheng W. General one-pot template-free hydrothermal method to metal oxide hollow spheres and their photocatalytic activities and lithium storage properties [J]. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2013, 5(18):9095-9100.
3. Zhang Q, Uchaker E, Candelaria S L, Cao G. Nanomaterials for energy conversion and storage [J]. *Chem Soc Rev*, 2013, 42 (7): 3127-3171.
4. Wei W, Cui X, Chen W, Ivey D G. Manganese oxide-based materials as electrochemical supercapacitor electrodes [J]. *Chem Soc Rev*, 2011, 40 (3):1697-1721.
5. Hou, C.; Lang, X.Y.; Wen, Z.; Zhu, Y.F.; Zhao, M.; Li, J.C.; Zheng, W.T.; Lian, J.S.; Jiang, Q. Single-crystalline Ni(OH)₂ nanosheets vertically aligned on a three-dimensional nanoporous metal for high-performance asymmetric supercapacitors [J]. *J. Mater. Chem. A*, 2015, 3, 23412-23419.

锑烯各项异性能带结构和范德华尔斯作用研究

雷涛、李金梅、奎热西、张凯

郑中国科学院苏州纳米技术与纳米仿生研究所, 苏州 215123

Email: tlei2018@sinano.ac.cn

摘要: 锑烯是最近发现的一种具有高载流子迁移率、合适的带隙和强自旋轨道耦合的二维半导体材料, 它有望在电子、光电子和未来的自旋电子学中有重要应用。电子结构作为材料的基本性质决定了材料的电子输运、光学和拓扑性质, 然而, 直接探测锑烯的电子结构需要获得宏观尺度的、不受气体污染的纯粹单原子层的锑烯材料。在这项工作中, 课题组采用超高真空分子束外延手段, 在拓扑绝缘体 Bi_2Te_3 衬底上获得了高质量的锑烯, 并利用角分辨光电子能谱技术完整的描绘了锑烯的能带结构。锑烯价带结构在 (E, k) 空间中呈现出向上的锥形结构, 表现金属性特征, 而价带结构呈现 M 型特征, 表现出半导体特征。同时, 受到锑烯六角型面内晶格导致的六重对称晶体场调制, 价带和表面态均表现出强烈的六角翘曲结构。沿着 $\bar{\Gamma}-\bar{K}$ 和 $\bar{\Gamma}-\bar{M}$ 两个高对称方向的费米速度分别为: $4.56 \times 10^5 \text{m/s}$ 和 $1.82 \times 10^5 \text{m/s}$, 有效质量分别为 $-0.19m_0$ 和 $-0.38m_0$, 预示着锑烯在 zigzag 和 armchair 方向不同的电子学性质。同时, 利用高分辨同步辐射光电子能谱技术, 我们观察到锑烯/ Bi_2Te_3 范德华尔斯异质结的电子态密度的重新分布, 范德华作用力表现了同共价键相类似的特征, 这为理解二维材料和范德华异质结体系表现的新奇物理和器件性能提供了重要证据。

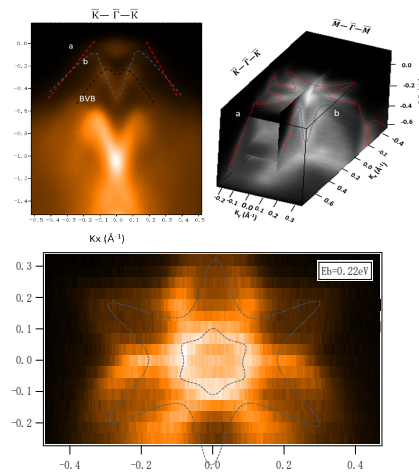


图 1 锑烯各项异性的能带结构

关键词：铋烯 能带结构 范德华尔斯异质结

参考文献（中文小五号宋体，其中英文和数字为 Times New Roman 小五号字）

- 【1】 Lei.T et al., Electronic structure evolution of single bilayer Bi(111) film on 3D topological insulator Bi₂SexTe_{3-x} surfaces, Journal of Physics: Condensed Matter 28(25): 255501

G-P030

专题代号： G

Structure-dependent C-C coupling reaction of methanol on
anatase TiO₂ (001) surface at near room temperature

Yi Zheng, Yuanyuan Ji, Xiaochuan Ma, Xintong Li, Xuefeng Cui, Bing
Wang

Hefei National Laboratory for Physical Sciences at the Microscale, University of
Science and Technology of China, Hefei, Anhui 230026

Email: puck@mail.ustc.edu.cn

Abstract. Coupling reactions have been reported on the widely-investigated TiO₂ including anatase (001) surface which is the most reactive one based on theoretical calculations. Our temperature-programmed desorption (TPD) experiments discover a series of C-C coupling products while exposing large amounts of methanol at near room temperature, and we determined their chemical formula by using the isotopes of H and O. Comparing with low energy electron diffraction (LEED) and scanning tunneling microscopy (STM) results, we believe that the reaction occurs on the (1×4) reconstructed ridge. The yields of products change with the increase of exposure, and the dominant products change from CH₃COOH and CH₃COOCH₃ to -CH₂OCH₂- (ethylene oxide) and CH₃CHO, from CH₃CH₂OH to CH₃OCH₂CH₂OH. These conversions are also confirmed by X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) and STM, allowing us to look into the related structure evolution. We find two different adsorptions of methanol, along the ridge or

perpendicular to the ridge forming a pair, the latter is quite unique only taking away oxygen atom from the ridge rather than from methanol, desorbing at $\sim 570\text{K}$ as ethylene oxide which is the only product at this temperature.

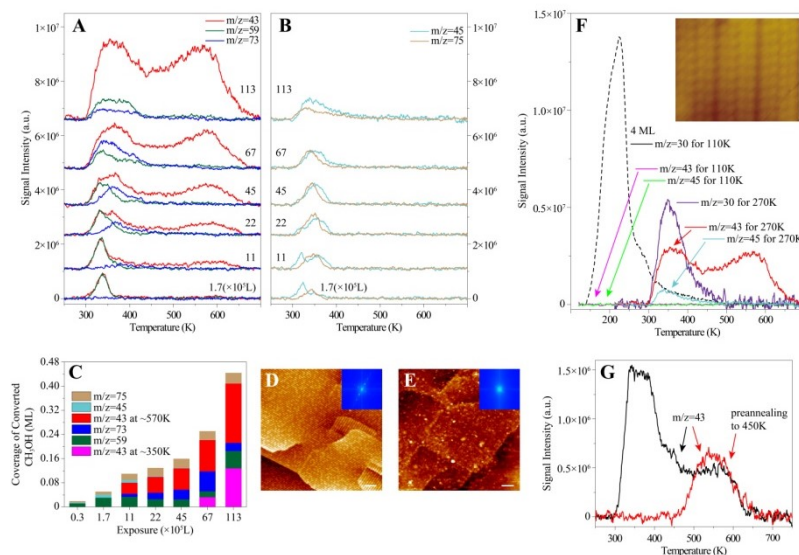


Figure 1. Products of C-C coupling reaction of methanol on anatase TiO_2 (001) surface at near room temperature and the yields conversion as the exposure changes. (A,B) TPD spectra of $m/z = 43, 45, 59, 73$ & 75 from different exposure of CH_3OH at 270K , spectra has been moved vertically for better demonstration. (C) Yields conversion of the products as the exposure changes. (D,E) STM images of clean (1.8V , 10pA) and heavily exposed (3V , 10pA) TiO_2 surface, scar bar: 10nm . Insert: corresponding fast fourier transform images. (F) TPD spectra of $m/z = 30, 43$ & 45 from 0.4L (one monolayer) CH_3OH at 110K and $1.13 \times 10^7\text{L}$ CH_3OH at 270K . Insert: STM image (1.5V , 4pA) of fully adsorbed CH_3OH at 80K , each 1×4 unit has 4 CH_3OH molecular, size: $3.2\text{nm} \times 2.6\text{nm}$. (G) TPD spectra of $m/z = 43$ from $2.2 \times 10^6\text{L}$ CH_3OH at 270K and preannealing to 450K .

Key Words: C-C coupling, TiO_2 , methanol, ethylene oxide, TPD, STM

基金项目：

1:the Ministry of Science and Technology of China (Grant 2016YFA0200603)

2:The National Natural Science Foundation of China (Grants 91421313, 21421063)

3:Anhui Initiative in Quantum Information Technologies (AHY090300)

G-P031

专题代号: G

尖晶石磁性半导体中氧空位增强磁性的研究

彭邵勤¹、张如意^{1*}、段俊熙²、刘坤³、汪宏³、曹彦伟^{1*}

¹ 中国科学院宁波材料技术与工程研究所, 宁波 315201;

² 北京理工大学, 北京 10081;

³ 西安交通大学西安 710049

Email: zhangruiyi@nimte.ac.cn; ywcao@nimte.ac.cn

摘要: 兼具半导体能带和高自旋极化率的磁性半导体材料对于发展自旋电子器件具有重要意义。与此同时, 对具有自旋、电荷、轨道和晶格自由度高度耦合的过渡金属氧化物的氧空位掺杂研究产生了一系列重要的新颖物性。本文利用射频磁控溅射技术, 通过选择 NiCoO₄ 薄膜金属-绝缘转变相变位置生长参数, 制备了具有高度结晶质量的 NCO 薄膜。X 射线光电子能谱分析表明, NCO 薄膜存在约 6% 的氧空位浓度。倒易空间扫描显示薄膜面外晶胞参数由于氧空位的作用而出现显著的膨胀。同时, 氧空位掺杂导致 NCO 薄膜室温电导特性从 p 型转变为 n 型。更加有趣的是, 对 NCO 低温磁性测量发现薄膜在 5 K 以下磁性存在显著增强。氧空位掺杂的 NCO 薄膜具有 3.5 μB/f.u. 的最大磁化强度, 相对此前研究存在约 75 % 的磁性增强。NCO 薄膜电输运性能测试表明薄膜存在显著的线性负磁阻, 同时在低温发现自旋翻转之外的磁阻贡献。本文提出了氧空位诱导局域铁磁性的模型用以解释低温磁性增强及低温磁阻的现象。利用氧空位增强 NCO 薄膜的磁性的研究对调控磁性半导体的磁性能具有重要的意义。

G-P032

专题代号: G

非中心对称 BaTiO₃ 薄膜中的非常规晶体场劈裂

耿寒松¹、宋洋^{1,2}、张如意^{1,2}、裴宇娟¹、毕佳畅^{1,2}、曹彦伟^{*}

中国科学院宁波材料技术与工程研究所, 宁波 315201

中国科学院大学材料科学与光电技术学院, 北京 100049

Email: ywcao@nimte.ac.cn

摘要:

在铁电材料这样的非中心对称体系中, 深刻理解晶体场劈裂和轨道极化是具有重要意义的。通常在铁电材料中, 自发极化会与晶体结构产生耦合, 而晶体场劈裂又对晶体结构的畸变非常敏感; 这使得晶体场劈裂对轨道极化的贡献模糊不清。为了澄清这个问题, 我们选用了典型的 BaTiO_3 铁电材料来研究非中心对称 TiO_6 八面体中的晶体场劈裂对轨道极化的影响。首先, 利用脉冲激光沉积技术在 DyScO_3 (110) 单晶衬底上制备了四方相 BaTiO_3 外延薄膜, 通过反射高能电子衍射证明了薄膜具有高的结晶质量。再通过具有元素分辨的 X 射线吸收光谱和 X 射线线性二色谱表征了 BaTiO_3 的 Ti $L_{2,3}$ 吸收边, 结果表明 BaTiO_3 薄膜中的轨道结构是非常规的; 其 t_{2g} (d_{xz} , d_{yz} 和 d_{xy}) 轨道是简并的, 而 e_g ($d_{3z^2-r^2}$ 和 $d_{x^2-y^2}$) 轨道是劈裂的并且之间的能隙约为 100meV。这与传统的晶体场劈裂和轨道配置 ($d_{xz}/d_{yz} < d_{xy} < d_{3z^2-r^2} < d_{x^2-y^2}$ 或 $d_{xy} < d_{xz}/d_{yz} < d_{x^2-y^2} < d_{3z^2-r^2}$) 存在极大的不同。利用第一性原理计算结果表明, 产生这种新奇、非常规的轨道结构的原因是由于 BaTiO_3 薄膜中存在非中心对称 TiO_6 八面体中的极性和 Jahn-Teller 畸变之间的竞争行为。本研究将为通过操控轨道自由度实现铁电极化翻转进而调控新奇量子态提供了一条可行的方案。

关键词: BaTiO_3 晶体场劈裂 自发极化 Jahn-Teller 效应

G-P033

专题代号: G

Design of Single-Molecule Multiferroics for Efficient Ultrahigh-Density Nonvolatile Memories

Qing Yang, Tingting Zhong, Zhengyuan Tu, Lin Zhu, Menghao Wu(吴梦昊),* and Xiao Cheng Zeng*

School of Physics and Wuhan National High Magnetic Field Center
Huazhong University of Science and Technology

Wuhan, Hubei 430074, China

It is known that an isolated single-molecule magnet tends to become superparamagnetic even at an ultralow temperature of a few Kelvin due to the low spin switching barrier. Herein, single-molecule ferroelectrics/multiferroics is proposed, as the ultimate size limit of memory, such that every molecule can store 1 bit data. The primary strategy is to identify polar molecules that possess bistable states, moderate switching barriers, and polarizations fixed along the vertical direction for high-density perpendicular recording. First-principles computation shows that several selected magnetic metal porphyrin molecules possess buckled structures with switchable vertical polarization that are robust at ambient conditions. When intercalated within a bilayer of 2D materials such as bilayer MoS₂ or CrI₃, the magnetization can alter the spin distribution or can be even switched by 180° upon ferroelectric switching, rendering efficient electric writing and magnetic reading. It is found that the upper limit of areal storage density can be enhanced by four orders of magnitude, from the previous super-paramagnetic limit of ≈ 40 to $\approx 10^6$ GB*in.⁻², on the basis of the design of cross-point multiferroic tunneling junction array and multiferroic hard drive.

G-P034

专题代号: G

耦合拓扑绝缘体量子点的电子结构

刘繁、李健*

重庆邮电大学理学院, 重庆 400065

Email: jianli@cqupt.edu.cn

摘要: 我们利用基函数展开方法研究了横向耦合 HgTe 拓扑绝缘体量子点的电子结构。该结构量子点可以通过外加栅压的办法得到。我们可以通过控制两个量子点之间的距离从而调节它们之间的耦合强度。本文中我们选的限制势为 $V(r) = 1/2m^* \omega_0^2 \min((r-R)^2, (r+R)^2)$ 。通过改变耦合参数 $d = |2R|$ (即两个耦合量子点的中心之间的距离), 可以实现从弱耦合到强耦合的

转变。对于这个模型来说，耦合参数有两个极值：无穷大和零。对于 $d = 0$ 时，两个量子点重合，这是强耦合的极端情况，此时的基态性质与圆形 HgTe 拓扑绝缘体量子点相同。对于大距离的 d 值来说，我们得到的系统是由两个相同但完全分离的量子点所组成，它们是独立的，并且具有单个拓扑绝缘体量子点的相同属性。我们通过对弱耦合极限开始减小 d ，从而实现量子点电子结构的调控，并探索其在量子计算方面的应用。

关键词： HgTe 耦合量子点 拓扑绝缘体

参考文献

- 【1】 Wensauer A, Steffens O, Suhrke M, et al. Laterally coupled few-electron quantum dots[J]. Physical Review B, 2000, 62 (4): 2605-2613.
- 【2】 Li J, Lou W K, Zhang D, et al. Single-and few-electron states in topological-insulator quantum dots[J]. Physical Review B, 2014, 90(11): 115303.

基金项目：国家自然科学基金项目（NO.11604036）等

G-P035

专题代号： G

掺杂 MnO_2 -Au 纳米异质结对热催化反应增强调制作用

张梁唯、王佳乐*

东华大学理学院，上海市松江区人民北路 2999 号，201600

EMAIL: jiale.wang@dhu.edu.cn

摘要：热催化反应在污染物去除和化学品制造领域有着许多重要应用，然而许多热催化反应需要在高温高压的条件下进行，这增加了生产成本并引起了环境问题。我们使用水热法合成了具有独特多层结构的 $\delta\text{-MnO}_2$ 纳米花状结构，通过 Na 和 K 的掺杂使材料获得不同带隙，分别为 0.87eV(Na)和 0.75eV(K)然后，将均匀尺寸的 Au 纳米颗粒沉积在 MnO_2 上以形成金属-半导体纳米异质结。利用对氨基苯硫酚(PATP)分子热催化为对二巯基苯(DMAB)作为标尺来检测材料的热催化性能，发现相对于单独的 Au 纳米粒子， MnO_2 -Au 复合材料表现出更好

的热催化性能。催化性能的增强主要归因于 MnO_2 中的热激发电子转移到 Au 纳米粒子中，增加了电子密度，改善了热催化作用。同时，K 掺杂的 $\text{MnO}_2\text{-Au}$ 相对于 Na 掺杂 $\text{MnO}_2\text{-Au}$ 显示出了更好的热催化性能，这是因为 K 掺杂的 $\delta\text{-MnO}_2$ 的带隙比 Na 掺杂的 $\delta\text{-MnO}_2$ 的带隙更小，导致 K 掺杂的 $\delta\text{-MnO}_2$ 在相同温度下有更多的热电子被激发，这些热电子迁移至 Au 纳米颗粒，从而导致了更好的热催化效果。

关键词： $\text{MnO}_2\text{-Au}$ ，热电子激发，热催化

参考文献：

- [1] Hu, S.; Liu, X.; Wang, C.; Camargo, P.H.C.; Wang, J. Tuning Thermal Catalytic Enhancement in Doped $\text{MnO}_2\text{-Au}$ Nano-Heterojunctions. *ACS Appl. Mater. Interf.* 2019, **11**, 17444–17451.
- [2] Xu, Q.; Zhang, Y.; Mo, J.; Li, X. Indoor Formaldehyde Removal by Thermal Catalyst: Kinetic Characteristics, Key Parameters, and Temperature Influence. *Environ. Sci. Technol.* 2011, **45**, 5754–5760.
- [3] Gates, B. C. Supported Metal Clusters: Synthesis, Structure, and Catalysis. *Chem. Rev.* 1995, **95**, 511–522.
- [4] Williams, P. T.; Brindle, A. J. Catalytic Pyrolysis of Tyres: Influence of Catalyst Temperature. *Fuel* 2002, **81**, 2425–2434.
- [5] Sakakura, T.; Choi, J.-C.; Yasuda, H. Transformation of Carbon Dioxide. *Chem. Rev.* 2007, **107**, 2365–2387.
- [6] Guillaume, B., Romain, Q. Nanoplasmonics for chemistry. *Chem. Soc. Rev.* 2014, **43**, 3898–3907.
- [7] Liao, F.; Zeng, Z.; Eley, C.; Lu, Q.; Hong, X.; Tsang, S. C. E. Electronic Modulation of a Copper/Zinc Oxide Catalyst by a Heterojunction for Selective Hydrogenation of Carbon Dioxide to Methanol. *Angew. Chem., Int. Ed.* 2012, **51**, 5832–5836.

G-P036

专题代号： G

利用退火方法降低 CoFe_2O_4 和 NiFe_2O_4 纳米颗粒细胞毒性

严雅丽、王佳乐*

东华大学理学院，上海市松江区人民北路 2999 号，201600

摘要：磁性纳米颗粒材料由于其小尺寸、在外加磁场下的可操控性、良好生物相容性等独特性质，在生物医学上有很大的应用。对于过渡金属氧化物，例如铁酸钴（ CoFe_2O_4 ）、铁酸镍（ NiFe_2O_4 ）等材料，其具有优异的光学、磁性和电学等性质。然而，由于这些材料可溶解出有毒的钴（ Co^{2+} ）、镍（ Ni^{2+} ）等离子，因此阻碍了他们的广泛应用。所以研究材料的物理、化学等性质对其毒性的影响十分有必要。我们通过溶胶-凝胶法制备了 CoFe_2O_4 和 NiFe_2O_4 纳米颗粒，并且在不同温度下进行退火，利用 L929 小鼠成纤维细胞（L929 mouse fibroblast cells）进行毒性的测试。我们发现，一方面，提高退火温度可以提高晶体质量，降低表面晶格缺陷的浓度，使 Co 或 Ni 更好地固定在晶格位置，另一方面，较高温度下退火得到的纳米颗粒尺寸较大，这导致比表面积减小，从而降低从纳米颗粒表面溶解的离子数量。

关键词：磁性纳米颗粒，过渡金属氧化物，细胞毒性

参考文献：

- [1] Lima, D. R.;Jiang, N.; Liu, X.; Wang, J.; Vulcani, V. A.;Martins, A. Employing calcination as a facile strategy to reduce the cytotoxicity in CoFe_2O_4 and NiFe_2O_4 nanoparticles. *ACS Appl. Mater. Interfaces*,2017,**9**, 39830-39838.
- [2] Pankhurst, Q. A.; Connolly, J.; Jones, S. K.; Dobson, J. Applications of magnetic nanoparticles in biomedicine. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2003, **36**, R167–R181.
- [3] Mirahmadi-Zare, S. Z.; Allafchian, A.; Aboutalebi, F.; Shojaei, P.; Khazaie, Y.; Dormiani, K.; Lachinani, L.; Nasr-Esfahani, M-H Super magnetic nanoparticles NiFe_2O_4 , coated with aluminum-nickel oxide sol-gel lattices to safe, sensitive and selective purification of his-tagged proteins. *Protein Expression Purif.* 2016, **121**, 52 –60.
- [4] Ahmad, F.; Yao, H. Z.; Zhou, Y.; Liu, X. Y. Toxicity of cobalt ferrite (CoFe_2O_4) nanobeads in *Chlorella vulgaris*: interaction, adaptation and oxidative stress. *Chemosphere* 2015, **139**, 479–485.
- [5] Solís, C.; Somacescu, S.; Palafox, E.; Balaguer, M.; Serra, J. M. Particular transport properties of NiFe_2O_4 thin films at high temperatures. *J. Phys. Chem. C* 2014, **118**, 24266–24273.
- [6] Roongtao, R.; Vittayakorn, N.; Klysubun, W.; Vittayakorn, W. C. Effect of annealing time on the cation distribution in Mn doped CoFe_2O_4 . *Ferroelectrics* 2016, **492**, 43–53.

SrTiO₃(110)表面的反常等离子激元

林子荐、朱学涛、郭建东

中国科学院物理研究所，北京 100190

Email:linzijian@iphy.ac.cn

摘要：FeSe/SrTiO₃ 的超导界面增强效应吸引了人们广泛的研究兴趣，但是其界面超导增强的微观图像尚不明确。之前的工作表明 SrTiO₃ 的极化场对 FeSe 的超导电子增强起了重要作用，而由极化场引起的极化子等离子激元、动态极化子和极化子之间相互作用就在 SrTiO₃/FeSe 体系中扮演了重要的角色。因此，作为界面超导增强的重要因素，SrTiO₃ 的各种表面元激发的研究受到了极大关注。

与此前的研究基本都集中在 SrTiO₃(001)表面不同，在此，我们研究组将元激发的研究扩展到 SrTiO₃(110)表面，这里使用了高分辨电子能量损失谱(HREELS)测量了 Nb 掺杂的 SrTiO₃(110)表面元激发。我们发现了一支能量在 100~200 eV 之间变化，与此前的极化子等离子激元类似的等离子激元模式，这支模式的特征是其能量随着温度的降低而显著变大。此外，我们还对 SrTiO₃(110)表面进行了不同方式的处理。在单纯加热退火的 SrTiO₃(110)表面，上述的等离子激元模式非常强烈，然而在经过氩离子溅射及后退火的 SrTiO₃(110)表面上，这支等离子激元强度很弱，甚至消失。这些反常的结果可能将对 FeSe/SrTiO₃ 界面超导体体系的进一步研究提供线索。

关键词：等离子激元钙钛矿氧化物钛酸锶 SrTiO₃ 高分辨电子能量损失谱

贵金属纳米材料的热电子利用效率的原位 SERS 研究

种榉、付玉洲、李若平、黄明举

河南大学物理与电子学院，河南省光电信息材料与器件重点实验室开封
475004

Email: hmingju@163.com

摘要：贵金属纳米材料在光诱导下具有表面等离子共振效应(SPR)，其表面会出现高度局域化的热点(电磁场被明显增强的位置)，从而产生大量高能热电子-空穴对。该类热电子可驱动多种物理化学反应的进行。鉴于目前热电子极低的产生率和利用率制约了其发展与应用，本文对如何提高热电子的利用效率进行了表面增强拉曼散射（SERS）的实验与理论研究。

首先，我们分别以 SERS 增强材料 Au 纳米粒子和 Au@SiO₂ 核壳纳米粒子光催化下的对硝基苯磺酚（pNTP）作为研究对象，确认了热电子的产生来源，并对比得出 Au 粒子与 pNTP 分子在化学成键状态下热电子利用效率最高的结论。随后，为了研究不同材料对热电子利用效率的影响，我们在 Au 粒子表面分别包覆了金属 Ag、半导体 Ag₂S 和绝缘体材料 SiO₂，并以这三种核壳纳米粒子作为光催化剂同时也作为 SERS 增强材料，对 pNTP 的催化反应实施了原位 SERS 监测。结果表明，金/半导体异质结结构形成的肖特基势垒使热电子具有更长的寿命，从而在驱动催化反应上具有明显优势。相关结果为光催化材料的选择提供了可靠的实验依据，同时对热电子驱动的各项反应的研究也具有重要意义。

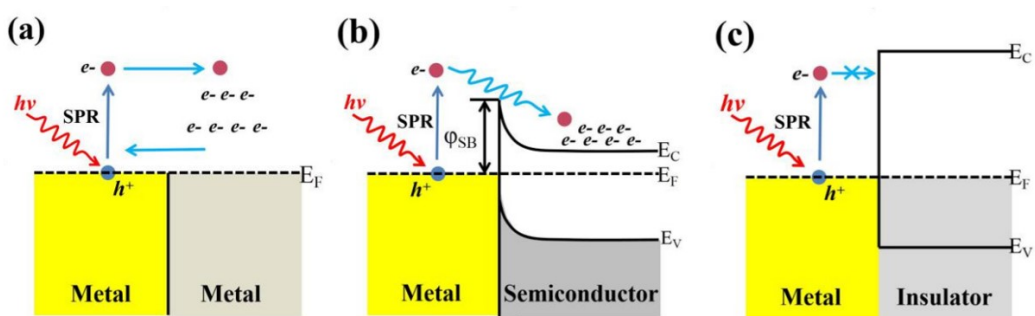


图 1 (a)金属/金属，(b)金属/半导体和(c)金属/绝缘体系统中等离子体诱导热载流子的产生和热电子转移过程。e⁻和 h⁺分别为热电子和空穴，E_C和 E_V代表导带和价带，E_F为费米能级。

关键词：原位 SERS 光催化热电子 pNTP 分子

参考文献

【1】 Y. Zhang, S. He, W. Guo, Y. Hu, J. Huang, J.R. Mulcahy, W.D. Wei, Surface-Plasmon-Driven Hot Electron Photochemistry, Chem Rev, 118 (2018), 2927-2954.

【2】 G.V. Hartland, L.V. Besteiro, P. Johns, A.O. Govorov, What's so Hot about Electrons in Metal Nanoparticles?, ACS Energy Letters, 2 (2017),1641-1653.

基金项目：国家自然科学基金项目（NO.61805069, 51502077）等

G-P039

专题代号： G

自支撑钙钛矿氧化物薄膜的磁性研究

陆勤雯，曹慧，张静娴，翟晓芳

中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心 230026

Email: luqinwen@mail.ustc.edu.cn

摘要：过渡金属氧化物钙钛矿二维薄膜由于中存在电子的多种自由度及其 d 轨道的强关联相互作用导致一系列能量相近的低能激发态或者相互竞争的基态，使材料表现出各种奇特的宏观性质，比如：高温超导、金属-绝缘体转变等。通过氧化物异质结构和界面的最新工程¹⁻⁷发现了块体材料中不存在的特性。而当通过强关联效应连接的其他自由度直接或间接控制自旋自由度时，磁性氧化物薄膜表现出高度可调的磁性，且在磁记录和磁光存储技术方面已有广泛的应用。最近，一些课题组研究出晶格匹配钛酸锶衬底很好的水溶性牺牲层氧化膜⁸⁻¹⁰，从衬底上溶解掉氧化膜以得到自支撑氧化物薄膜。

我们课题组发现自支撑氧化物薄膜的可调磁性在纳米尺度的氧化物体系中提供了一个新路径。磁性自支撑氧化物薄膜的晶体结构与外延生长的薄膜结构相同，但磁性测定结果表明，独立式薄膜表现出意想不到的磁化强度和旋转易轴重定向，且这种磁性的变化不是来自于锰的价态变化。这种方法对于稳定新的磁性基态具有关键意义，并且促进了氧化物薄膜与氧化物之外的其他材料的两个领域的结合发展。

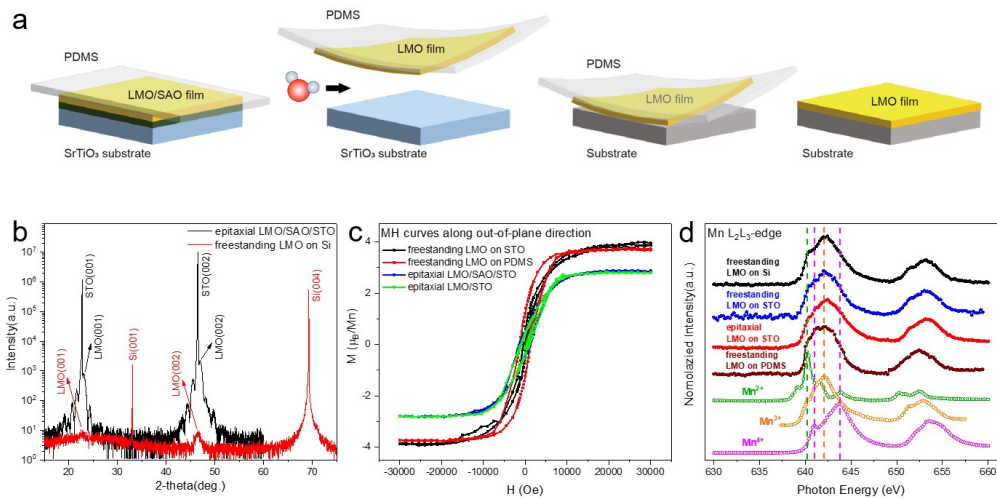


图 a:自支撑钙钛矿氧化物薄膜的制备；图 b:外延薄膜和自支撑薄膜的 XRD；
图 c:外延薄膜和自支撑薄膜的面外 MH 曲线；图 d:外延薄膜和不同衬底的自支撑薄膜的 XAS；

关键字: 自支撑钙钛矿氧化物薄膜, XRD, SQUID, XAS

参考文献:

- [1] J. A. Bert, et. al. Nat. Phys. **7**, 767 (2011).
- [2] L. Li, et. al. Nat. Phys. **7**, 762 (2011).
- [3] M. Gibert, et.al. Nat. Mater. **11**, 195 (2012).
- [4] S. Smadici, et. al. Phys. Rev. Lett. **99**, 196404 (2007).
- [5] A. Bhattacharya, et. al. Phys. Rev. Lett. **100**, 4, 257203 (2008).
- [6] C. He, A. J. Grutter, M. Gu, et. al. Phys. Rev. Lett. **109**, 5, 197202 (2012).
- [7] A. J. Grutter, H. Yang, B. J. Kirby, et. al. Phys. Rev. Lett. **111**, 5, 087202 (2013).
- [8] D. Lu, D. J. Back, S. Sae Hong, L. F. Kourkoutis, Y. Hikita, H. Y. Hwang, Nat. Mater. **15**, 1255 (2016).
- [9] L. Shen, L. Wu, L. Q. Sheng, et. al. Adv. Mater. **29**, 1702411 (2017).
- [10] Dianxiang Ji, Songhua Cai, Tula R. Paudel, et.al. Nature **570**, 7759 (2019).

G-P040

专题代号: G

NSTO 表面单层 SnSe₂ 薄膜中电荷密度调制与平带的出现

毛亚会 单欢 赵爱迪

中国科学技术大学微尺度, 合肥 230026

Email: yhmao@mail.ustc.edu.cn

adzhaio@ustc.edu.cn

摘要: 当材料的维度由三维到二维发生改变后, 往往伴随着诸多性质, 如能带结构、载流子密度、迁移率、铁电性、铁磁性、超导性等的变化。二维材料: 类石墨烯单元素烯、过渡金属硫族化合物、二维氮化硼、二维 1:1 配比硫族化合物 (FeSe) 等是近年的研究热点之一。而二维材料与不同衬底之间的相互作用同样伴随着新奇的物理特性的发生, 如单层 FeSe 薄膜在 SrTiO₃ 衬底上实现了大于 100K 的高温超导的出现^[1-2], SnSe₂ 薄膜在 HOPG 和 STO 衬底上出现超导^[3-5]等。

本课题组团队采用分子束外延 (MBE) 的方法在掺铌锆钛氧 (NSTO) 衬底上生长了类 TiSe₂ 结构的 SnSe₂ 薄膜。在此基础上, 利用低温扫描隧道显微镜 (STM) 和角分辨光电子能谱 (ARPES) 技术对 SnSe₂/NSTO 薄膜进行了形貌及能带结构等特性的表征。STM 实验发现, 单层 SnSe₂ 薄膜在 NSTO 衬底的作用下, 存在明显的电荷调制现象, 偏压-0.6V 为电荷调制出现的临界偏压, 在拓扑图与 STS 谱中均有体现。同时, 在 ARPES 实验中获得的能带结构中出现了近乎无色散的平带结构特征, 这一平带位于 $E_k = -0.7\text{eV}$ 的位置, 处于导带底与价带顶中间, 平带的能带宽度约为 300meV。这些结果证明了在衬底 NSTO 的作用下, SnSe₂ 薄膜中出现了电荷密度调制现象与新奇的平带特征。

关键词: SnSe₂ 薄膜电荷调制平带

参考文献

- [1] Qing-Yan W et al., Interface-induced high-temperature superconductivity in single unit-cell FeSe films on SrTiO₃. Chinese Physics Letters. 29(3): 037402 (2012).
- [2] J.F.Geet al., Superconductivity above 100 K in single-layer FeSe films on doped SrTiO₃, Nat. Mater. 14(3), 285(2015).
- [3] Yahui Mao et al., Signature of unconventional superconductivity in SnSe₂ atomic layers grown by van der Waals epitaxy. arXiv: 1712.10100 (2017).
- [4] Yi-Min Zhang et al., Observation of interface superconductivity in a SnSe₂/epitaxial graphene van der Waals heterostructure. Physical Review B. 98(22), 220508 (2018).

- 【5】 Zhibin Shao et al., Strongly compressed few-layered SnSe₂ films grown on a SrTiO₃ substrate: the coexistence of charge ordering and enhanced interfacial superconductivity. Nano Lett. 19, 8, 5304 (2019)

基金项目：国家重点研发计划(2017YFA0205004, 2018YFA0305603)

G-P041

专题代号： G

喷墨打印制备纸基半导体 SERS 基底

蓝雷雷、邱腾

东南大学物理学院，南京 211189

Email: tqiu@seu.edu.cn

Abstracts: As a powerful analytical tool of molecular detection, surface-enhanced Raman scattering (SERS) has attracted great attention in varied fields. However, it has seriously impeded the development of SERS that the preparation process is generally complicated and traditional substrates lack eco-friendliness, economy and flexibility. Herein, we fabricated the inkjet-printed paper-based semiconducting SERS substrates for the first time via an inexpensive office inkjet printer with representative two-dimensional MoO_{3-x} nanosheets ink. Compared with conventional substrates, these paper-based semiconducting substrates not only could meet the requirements of simple and large-scale preparation, but also realize efficient sample collection by merely swabbing the surface. We obtained the detection limit concentration of Rhodamine 6G as low as 10⁻⁷ M. Furthermore, these flexible paper-based substrates were successfully applied to detect crystal violet and malachite green on the fish surface by swabbing. With immense potentiality in practical applications, the inkjet-printed paper-based semiconducting SERS substrates are expected to open a new prospect for SERS.

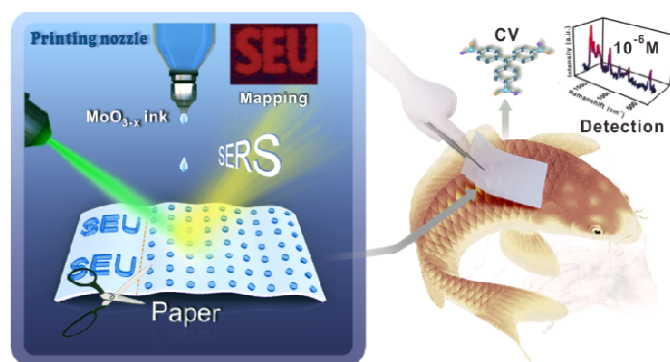


Figure 1: Schematic illustration of the fabrication process and applications for inkjet-printed paper-based SERS substrates.

Keywords: inkjet-printed, paper-based, charge transfer, surface-enhanced Raman scattering

References

[1] M. Lee et al., Subnanomolar sensitivity of filter paper-based SERS sensor for pesticide detection by hydrophobicity change of paper surface, ACS Sens. 2018, 3 (1), 151.

This work was supported by the National Key R&D Program of China (Grant No. 2017YFA0403600) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11874108).

G-P042

专题代号: G

First-Principles Simulation on Multilayer MoS₂

Bubbles Cooperate with Photoluminescence Observation

Luo Hailan^{1,2}, Li Xuanyi^{1,2}, Zhao Yanchong^{1,2}, Yang Rong¹, Sun Jiatao¹, Huang Yuan¹

¹Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

²School of Physical Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

Two-dimensional materials with special properties have attracted widespread interest since its birth. Here we propose an effective approach to fabricate large multilayer MoS₂ bubbles. We find out that two dominant peaks on the bubble (A_{1g} and E_{2g}^1) shift to lower wavenumber from

Raman spectra measurement, as well as strong photoluminescence (PL) emissions for both direct-gap and indirect-gap transition compared with flat areas. The key difference is that three PL signals are strongly enhanced on the bubble structure while indirect-gap transitions on flat MoS₂ flakes at 1.3 or 1.4 eV are hard to detect. Due to the special structure of bubbles, optical standing waves can be formed in the vicinity of the multilayer MoS₂ bubble, which clearly shown in PL oscillation images. First-principles calculations further unveiled the evolution process of band structures and charge density distributions of multilayer MoS₂ under a series of strain and separation distance. Evolution of band gap between some conduction band minimums and valence band maximums and charge density around two layers indicate that three main transitions with one direct and two indirect gaps can be realized in multilayer MoS₂ crystal, consistent with PL measurements.

G-P043

专题代号: G

第一性原理研究 CO₂ 在 Co/MoS₂ 上还原为甲醇

程莹洁¹, 路战胜^{1,2*}, 李硕³, 杨宗献¹, 马东伟⁴, Ruqian Wu^{2*}

¹ 河南师范大学物理学院, 新乡 453007, 中国

² 加州大学尔湾分校物理与天文系, 加利福尼亚 92697-4575, 美国

³ 布拉格查尔斯大学理学院物理与高分子化学系, 布拉格 Hlavova 8, 128 43 Prague
2, 捷克

⁴ 安阳师范学院物理系, 安阳 455000, 中国

Email: zslu@henannu.edu.cn ; wur@uci.edu

摘要: CO₂ 还原为液体燃料和其他化学品能够有效缓解温室效应、环境污染和能源危机。单原子掺杂 g-C₃N₄、TMN₄-graphene 等新型二维材料具有高效的催化 CO₂ 还原的性能。最近 Liu 等人报道了 Co 掺杂 MoS₂ 可促进加氢脱氧反应^[1], Li 等人报道了 Pt 掺杂 MoS₂ 可催化 CO₂ 氢化^[2]。这些研究表明过渡金属掺杂 MoS₂ 可以作为 CO₂ 还原为液体燃料和其他碳氢化合物的高效催化剂。

我们采用基于密度泛函理论的 Materials Studio 软件包的 DMol³ 模块, 详细地研究了 CO₂

在 MoS_2 负载单原子 Co 衬底上还原的多种反应路径。研究表明 Co-Mo-3S 是催化活性中心，单原子 Co 在 CO_2 还原过程中起了重要的促进作用。最佳反应路径为 CO_2 在 Co/ MoS_2 表面经过逆水煤气反应生成 CO，化学吸附状态的 CO 被氢化为 CHO 是整个 CO_2 还原过程的限速步，活化势垒为 1.11 eV。CHO 经过多步氢化后形成最终产物 CH_3OH ，并且产物 CH_3OH 在催化剂衬底上不易分解。反应速率计算表明 Co/ MoS_2 可加速高温下的 CO_2 还原反应。总之，Co/ MoS_2 材料对于 CO_2 还原反应具有较好的催化活性和产物选择性，计算模拟研究可以为此类材料在 CO_2 还原领域的实际应用提供理论基础。

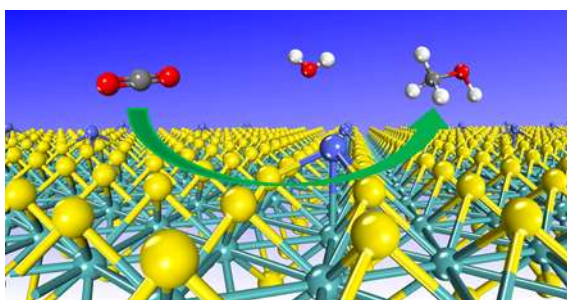


图 1 CO_2 在 Co- MoS_2 上还原为 CH_3OH

关键词：DFT-D； CO_2 还原；Co/ MoS_2 ； CH_3OH

参考文献

- 【1】 G. L. Liu et al., MoS_2 monolayer catalyst doped with isolated Co atoms for the hydrodeoxygenation reaction, Nat. Chem. 2017, 9, 810.
- 【2】 H. L. Li et al., Synergetic interaction between neighbouring platinum monomers in CO_2 hydrogenation, Nat. Nanotech. 2018, 13, 411.

基金项目：国家自然科学基金项目（NO. 11874141）

G-P044

专题代号： G

上海光源二期线站 E-line 合支站 AP-XPS、HP-STM 介绍

张欢

中国科学院大学上海应用物理研究所，上海 200120

摘要：近几十年来，随着表面科学表征技术的飞速发展，具有原子分辨和轨道分辨率等优点的显微镜、谱仪等仪器在材料科学、能量的转换和储存等领域得到了广泛的应用，其中，STM 和 XPS 已经成为表面科学中用于精细结构研究的两种最通用和最方便的表征技术。宋飞课题组在上海光源 E-Line 的 BL20U 线站最新搭建了一台 High Pressure-STM (HP-STM)、一台 Ambient-Pressure XPS (AP-XPS)。与超高真空下的 STM、XPS 相比，HP-STM 与 AP-XPS 能更加真实的模拟反应条件，从而直接得到反应过程中各反应物的形貌、价态结构和核能级轨道的变化。在此基础上，能开展的科学研究十分广泛，如超高真空中不能进行的固-液、固-气系统均可在这两套设备中实验。E-Line 的软、硬 X 射线、合支光子能量设计范围为 150 eV-10 keV，逃逸电子动能范围为 100 eV- 9k eV，探测深度从亚纳米到几个微米，可以实现逐原子层分辨。

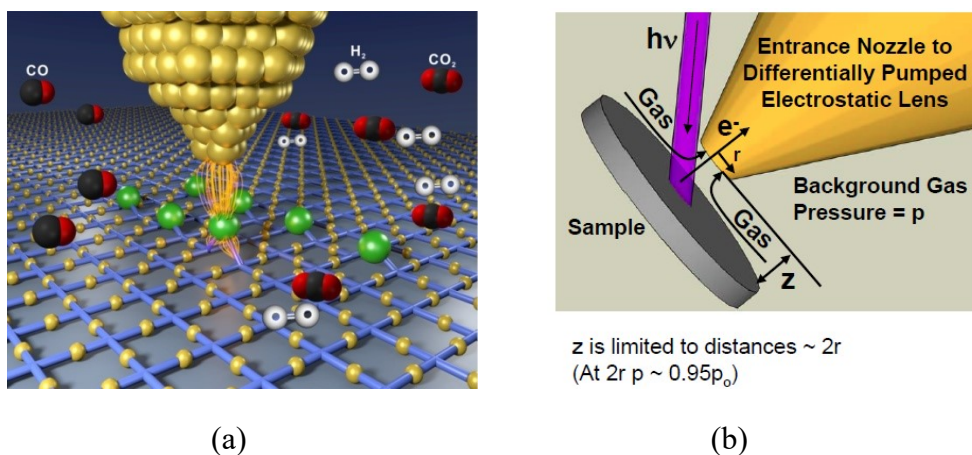


图 1 (a) HP-STM 的模拟实验环境。(b) AP-XPS 实验中反应条件下的结构简图。

关键词：HP-STM AP-XPS 界面结构

基金项目：国家自然科学基金项目（91545101, 11874380, U1732267）。

G-P045

专题代号： G

BaBiO₃ 薄膜的氧八面体旋转和 CDW 晶格畸变的探测

刘其鑫, 曹慧, 翟晓芳

中国科学技术大学微尺度物质科学国家研究中心,合肥 230026

Email: liuqixin@mail.ustc.edu.cn, cnxfzhai@ustc.edu.cn

摘要: 凝聚态物质结构的精细探测是研究人员长期关注的挑战性课题。钙钛矿氧化物薄膜的电子结构和磁性等宏观性质与结构相关,特别是与氧八面体的扭曲与旋转有关^[1]。相比块状化合物,氧化物薄膜在应力、界面等作用下,通常表现出与块体不同的物理性质。为了充分了解钙钛矿薄膜的新奇效应,揭示氧八面体键角、键长和宏观物理性质之间的相关性,本文选取 BaBiO₃ 薄膜进行分析研究。

BaBiO₃ 为单斜层状结构,是电荷不成比例的绝缘体,具有不成比例的 Bi-O 键长,旋转模式为 a-a-a-。由于氧原子的弱散射性质,直接测量八面体旋转是具有挑战性的^[2]。本文采用基于半阶衍射峰测量的同步加速器衍射方法,通过同时模拟氧八面体旋转和形变,研究了不同氧含量的 BaBiO₃ 薄膜的氧八面体旋转和 CDW 晶格畸变的定量变化。相比前人工作,本文同时考虑不同区域氧八面体变形的不对称性,考虑 CDW 原子位置易位,引入变形因子 δ , 取得较好的效果。结论如下,随着氧含量减少,CDW 原子位置易位减小。本文采用基于遗传算法的非线性寻优算法,求解衍射方程,将测量强度与计算强度进行比较,获得旋转角度、键长和变形因子,确定钙钛矿元胞的原子位移,得出结构对薄膜宏观性质的影响。具体算法实现:将所有待求解变量进行二进制编码,并拼接起来。然后初始化种群,计算个体适应度,并通过选择、交叉和变异算子找到最优个体。当迭代次数是十的整数倍时,采用非线性寻优算法,直至达到终止条件。

关键词: 氧八面体旋转, CDW 晶格畸变, 遗传算法, 非线性寻优

参考文献:

- [1] May S J , Kim J W , Rondinelli J M , et al. Quantifying octahedral rotations in strained perovskite oxide films[J]. Physical Review B, 2010, 82(1):014110.
- [2] May S J , Smith C R , Kim J W , et al. Control of octahedral rotations in (LaNiO₃)_n/(SrMnO₃)_m superlattices[J]. Physical Review B Condensed Matter, 2011, 83(15).

G-P046

硅烯中超结构诱导的狄拉克锥劈裂

冯宝杰, 周辉, 冯娅等

二维材料在原子尺度上的调控能够创造拥有丰富物理和化学性质的器件。外加周期势可以操控材料的电子能带结构。(3x3)-硅烯/银(111)是一个衬底产生周期性调制的典型系统。我们采用线性二色角分辨光电子能谱, 紧束缚模型, 和第一性原理计算, 揭示了该系统中狄拉克锥主要起源于独立硅烯中位于 K(K')的狄拉克锥。独立硅烯中的狄拉克锥由于受到衬底产生的周期势的调制而劈裂, 得到实验观察的(3x3)-硅烯/银(111)系统中的狄拉克锥。我们的结果不仅给出了(3x3)-硅烯/银(111)系统中狄拉克锥的起源, 同时也为二维材料电子结构的调控提供了有效途径。

G-P047

不同微观结构 SnS₂ 的可控制备及其光学特性

林高翔、郑韬、卢捷、周颖慧、张学鹜、蔡伟伟

厦门大学物理系, 厦门 361005

近年来, 过渡金属硫族化合物、IIIA-VA 族、IVA-VIA 族化合物等类石墨烯二维材料, 由于其可调谐的带隙及在催化、微电子、光电子等领域的潜在应用, 受到了广泛的关注。其中, IVA-VIA 族化合物 SnS₂ 是一种具有 2.2~2.6 eV 能隙的 n 型半导体, 其高的开/关比和良好的光学响应特性, 使其在光电子器件等领域的应用中占有一席之地。在此项工作中, 我们采用改进的化学气相沉积方法成功地在 SiO₂/Si 衬底上制备了具有不同空间结构的 SnS₂ 纳米晶体以及在二维衬底上制备了原子级薄层 SnS₂。所制备的原子级 SnS₂ 薄层, 其尺寸为 1~10 μm, 厚度为 0.75nm, 可在 310 cm⁻¹ 附近观察到明显的拉曼特征峰, 对应于二硫化锡的 A_{1g} 振动模式。而 SnS₂ 纳米晶体表现为沿(001)晶向生长的 2H 堆叠型单晶, 元素分布均匀, 平面尺寸范围在 10~60 μm, 厚度变化从百纳米到几个微米。通过生长条件的调控, 其形状可呈现为六棱台或六角形锥体, 并在不同波长光照下表现出光学图样差异。进一步我们结合原

子力显微镜和拉曼表征，对所制备 SnS_2 的微观结构和光学特性进行分析，给出了计算材料折射率等参数的简便方法。

关键词：二维材料 二硫化锡 微观结构 光学特性

基金项目：中央高校基本科研业务费专项资金 (No. 20720190050)

G-P048

专题代号： G

垂直磁各向异性薄膜/ WTe_2 异质结中的自旋轨道转矩研究

吕文星、薛宏伟、蔡佳林、张宗芝、曾中明

中国科学院苏州纳米技术与纳米仿生研究所，苏州 215123

复旦大学信息科学与工程学院，上海 200433

Email: zmzeng2012@sinano.ac.cn

摘要：自旋电子学是近 30 年来发展起来的一个重要的新兴交叉学科，它利用电子的自旋而非电荷属性实现对信息的存储和计算。相对于传统的半导体技术，具有非易失性、抗辐照等显著优势。其中，自旋轨道转矩(SOT)在自旋电子器件的应用中具有结构紧凑、能耗低等优点，受到了广泛的关注。因此，研究具有足够强自旋轨道耦合作用的新型材料或材料组合已成为自旋电子学研究的重点之一。近年来，二维材料体系中的过渡金属硫化物(TMDs)由于其丰富的自旋特性，在国际上引起了广泛关注。另一方面，利用具有垂直磁各向异性的薄膜制备成的自旋电子器件可进一步降低能耗，且进一步提升器件的集成度。基于上述内容，本文利用磁控溅射的方法，在二维过渡金属硫化物 WTe_2 表面溅射复合磁性薄膜 Ta/TbCo，其中 WTe_2 具有强的自旋轨道耦合作用，Ta/TbCo 具有垂直磁各向异性。进一步地，利用微纳加工工艺将多层膜制备成霍尔巴器件，通过谐波测量及反常霍尔效应表征该复合体系的自旋特性。研究发现， WTe_2 的引入可显著提高器件的 SOT 效率，且随着 WTe_2 厚度的增加，SOT 效率从-0.06 上升至-0.14，提高了一个数量级，分析其与 WTe_2 中自旋霍尔效应引起的阻尼矩有关。这些结果为研究二维/磁性材料复合结构的 SOT 效应提供了更深入的认识，并为如何将二维材料集成到自旋电子器件，及开发高性能 SOT 器件提供了重要的研究基础。

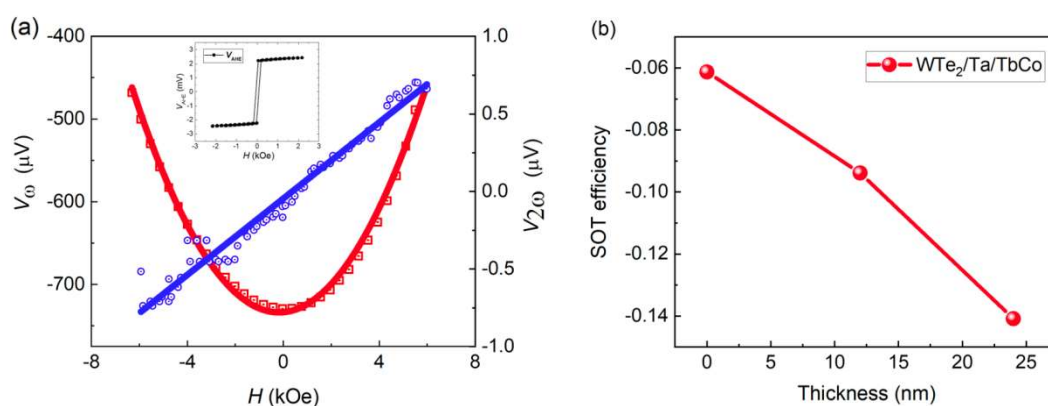


图 1 (a) 纵向磁场的一阶谐波（红）和二阶谐波（蓝）电压及其拟合曲线。纵向磁场方向与电流方向平行。插图：器件的反常霍尔效应。(b) SOT 效率随 WTe_2 厚度的变化关系，其中计算 SOT 效率采用器件的平均电阻率。

关键词： WTe_2 垂直磁各向异性 异质结 自旋轨道耦合效应

- 【1】 Q. Dong et al., Giant Enhancements of Perpendicular Magnetic Anisotropy and Spin-Orbit Torque by a MoS_2 Layer, *Adv. Mater.* 2019, 31 (21), 1900776.
- 【2】 P. Li et al., Spin-momentum locking and spin-orbit torques in magnetic nano-heterojunctions composed of Weyl semimetal WTe_2 , *Nat. Commun.* 2018, 9(1), 3990.

基金项目：国家自然科学基金项目 NO. 51761145025, No.11474311, No.11804370

G-P049

专题代号： G

石墨烯表面等离激元改善的 ZnO/GaN 异质结 LED 发光效率研究

邱越，刘为振，徐海阳，刘益春

紫外光发射材料与技术教育部重点实验室，东北师范大学，吉林 长春 130024

Email: qiuy748@nenu.edu.cn

摘要： ZnO 作为一种典型的第三代半导体，其宽禁宽度为 3.37 eV，激子束缚能高达 60 meV，

是发展短波长、低阈值发光/激光二极管（LEDs/LDs）的理想候选材料之一。¹一维 ZnO 纳米结构(如纳米线、纳米棒、纳米管等)因具有优异的电学输运和光学特性，使得其在光电子器件中得到了广泛的应用。石墨烯是由单层碳原子组成的二维蜂窝结构，其结构中存在 sp^2 杂化的导电纳米团簇，有效增强了其周围的局域电场，可作为表面等离子激元改善发光材料的发光效率。

本文中，我们采取湿法将石墨烯转移至 GaN 衬底上，利用水热法生长 ZnO 纳米线，构建如图（d）所示器件结构。转移石墨烯至 GaN 衬底之后，在不破坏石墨烯表面结构的前提下，需采用氧等离子体轰击石墨烯表面，有利于获得高质量的单晶 ZnO 纳米线(图(a)、(b))，从而进一步改善了 ZnO 的紫外发光行为，通过光致发光以及电致发光的表征，获得了明显的紫外发射改善（图（c）、(f)）。这是由于石墨烯表面等离子激元与 ZnO 激子之间发生共振耦合作用，从而得到了 ZnO 紫外发射增强效果。

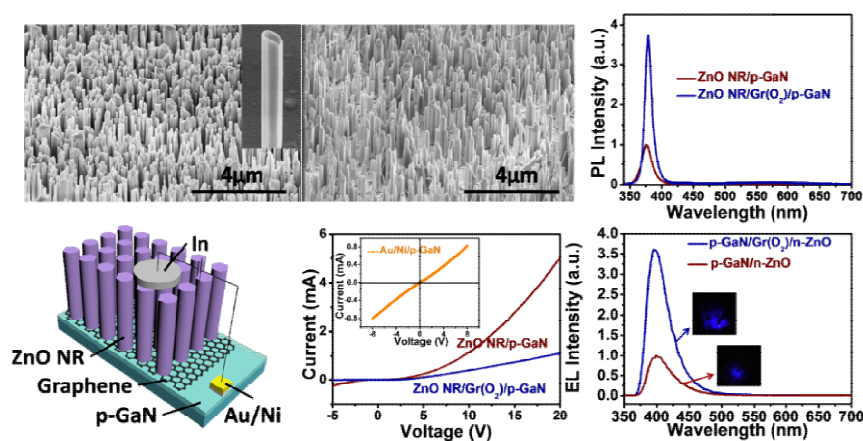


图 1 SEM, PL, 器件结构, IV, EL

关键词：ZnO 纳米线，石墨烯表面等离子激元，异质结 LED

- 【1】 W. Z. Liu et al., Localized surface plasmon-enhanced ultraviolet electroluminescence from n-ZnO/i-ZnO/p-GaN heterojunction light-emitting diodes via optimizing the thickness of MgO spacer layer. *Applied Physics Letters* 2012, 101 (14), 142101

基金项目： This work was supported by the Program of the NSFC (No. 51732003, 51872043, 61604037, 11874104), the “111” Project (No. B13013), the Fund from Jilin Province (No. JJKH20180007KJ and JJKH20190274KJ) and the Fundamental

G-P050

专题代号: G

The influence of annealing treatments on the microstructural and optical properties of a-SiC_x:H films embedded with carbon nanodots

Lihua Jiang^{a,b,c,*}, Yu Peng^a, Tao Wang^a, Haiyan Tian^a, Ting Xiao^a, Peng Xiang^a, Yihua Sun^a, Xinyu Tan^{a,*}

^a College of Materials and Chemical Engineering, China Three Gorges University, 8 Daxue Road, Yichang, Hubei 443002, China

^b Hubei Provincial Collaborative Innovation Center for New Energy Microgrid, China Three Gorges University, 8 Daxue Road, Yichang, Hubei 443002, China

^c College of Materials and Chemical Engineering, Key Laboratory of Inorganic Nonmetallic Crystalline and Energy Conversion Materials, China Three Gorges University, Yichang 443002, China

*Corresponding author. E-mail address: jlihua107@ctgu.edu.cn (Lihua Jiang); tanxin@ctgu.edu.cn (Xinyu. Tan).

Abstract:

In order to obtain the carbon nanodots dispersed in the solid state films, carbon-rich amorphous hydrogenated silicon carbide (a-SiC_x:H) films were prepared by PECVD method and were subsequently annealed at Argon protective environment for 30 mins with different annealing temperatures (T_a). Raman spectra show that the amorphous carbon nanodots were formed within the a-SiC_x:H films as T_a is equal to and higher than 600 °C. Meanwhile, the decomposition and transformation from sp³ C to sp² C of the carbon nanodots can be inferred by the Raman spectra with increasing T_a. XPS analysis suggest that the near-surface oxidation become strong as T_a > 600 °C which can be contributed to the chemical bond reconstruction and the formation of carbon

nanodots within the films. UV-Vis spectroscopy present that the thickness of the a-SiC_x:H films may be diminished and the surface of the a-SiC_x:H films may become more rougher as T_a is higher than 600 °C. The decrease of the optical band gap derived from the measured absorption spectra of the films can be attributed to the formation and graphitization of the carbon nanodots within the a-SiC_x:H films. HRTEM measurements indicate that the improvement of the dispersion, the enhancement of the areal density and the size reduction of the carbon nanodots take place within the a-SiC_x:H films with increasing T_a. However, the dispersion of the carbon nanodots embedded in the a-SiC_x:H films is still very bad compared with that of the CQDs dispersed in chemical solvents. PL measurements show that the PL signals may originate from the related defect states rather than the carbon nanodots within the a-SiC_x:H films. This work will be meaningful for providing a new avenue for the preparation of carbon quantum dots and useful for their application in solid state optoelectronic devices.

Key words: Carbon nanodot; PECVD; a-SiC_x:H films; Annealing treatment

G-P051

专题代号: G

Femtosecond Laser-induced Structural Transitions in Graphite

宋晨晨

Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

E-mail: songcc@iphy.ac.cn

There is growing interest in ultrafast light-induced phase transitions. Here we use a time-dependent ab initio package (TDAP) to simulate electronuclear dynamics in graphite under femtosecond laser excited conditions. Following the photoexcitation, graphite undergoes dramatic structural changes. The interlayer spacing of graphite rapidly contracts to about 2 angstroms within the first 130 femtoseconds, and then gradually forms interlayer bonds. The optical excitation of graphite transfers electrons from the valence band to the conduction band, generating a strongly nonequilibrium

distribution. Electronic excitation leads to coherent lattice responses in graphite. Initial carrier relaxation is dominated by the interaction with the specific strongly coupled optical modes, i.e., $\Gamma - E_{2g}$ and $K - A_{1'}$. Photoexcitation provides a possible nonthermal path for the transformation of graphite into hexagonal diamond.

G-P052

专题代号： G

压力对原子级薄 WSe_2 半导体器件的输运特性调控研究

孙艺琛、邵继峰、凡华、赵悦

南方科技大学物理系，深圳518051

Email: 11849407@mail.sustech.edu.cn

摘要: 当材料或者器件在某个维度尺寸缩小至纳米量级, 会出现一系列的量子力学现象, 这往往伴随着新的物理机制和奇特物性。过渡金属硫族化合物 (TMDC) 材料层与层间依靠弱的范德瓦尔斯力, 沿着晶轴c方向相互堆叠而成, 很容易通过机械剥离、CVD生长等手段精确得到原子级薄的样品。TMDC体系还存在强的自旋轨道耦合, 自旋 (spin) 和谷 (valley) 纠缠在一起, 某些材料 ($NbSe_2, TaSe_2$) 还存在超导电性和电荷密度波等丰富的物理内容, 使得TMDC成为探索低维物理基础研究的理想选择。相比石墨烯的零能隙, TMDC的半导体的行为在电子器件应用方面存在先天优势。当前, 在原子级薄的TMDC半导体器件的量子输运测试研究中面临的主要难题是, 接触电阻非常高, 载流子迁移率比较低, 器件在低温下不导通。目前, 研究改善接触电阻的方案主要有选择功函数匹配的金属电极, 石墨烯电极, 退火处理和电极接触部分材料的相变处理等, 由于工艺复杂, 重复性差等原因, 效果并不理想。

压力作为一个纯粹的热力学物理量, 可以显著影响物质的结构和特性, 如压缩原子间距, 改变晶格或者电子结构等, 同时不引入杂质等其他外来干扰因素, 具有重要的研究意义。本课题组引入0-3GPa的准净水压对二维原子级薄的TMDC器件的电输运行为进行调控研究, 发现压力可以显著改善接触电阻 (降低3个量级), 提高载流子迁移率, 这对研究器件低温量子输运特性具有重要意义。其原因可能在于压力增强了二维vanderwaals器件的层间耦合作用, 降低材料与接触电极的肖特基势垒, 增大电极接触面积等。

关键词：WSe₂接触电阻压力肖特基势垒

参考文献

1. Avinash P. et al. Pressure-Modulated Conductivity, Carrier Density, and Mobility of Multilayered Tungsten Disulfide. ACS Nano., 2015, 9(9):9117.
2. Yabin Chen et al. Pressurizing Field-Effect Transistors of Few-Layer MoS₂ in a Diamond Anvil Cell. Nano Lett., 2017, 17(1):194-199.
3. Matthew Yankowitz et al. Dynamic band-structure tuning of graphene moiré superlattices with pressure. Nature, 2018, 557(7705):404-408.
4. Feng Ke et al. Large band gap of pressurized trilayer graphene. PNAS, 2019, 116(19):9186-9190.

基金项目：国家自然科学基金项目（NO.11804402，No.11674150）

G-P053

专题代号： G

二维材料的表面气体掺杂及其发光性能的调控

闫佳旭、李远征、刘为振、徐海阳

紫外光发射材料与技术教育部重点实验室，东北师范大学，吉林 长春 130024

Email: yanjx790@nenu.edu.cn

摘要：单层过渡金属硫属化合物（TMDs）凭借其独特的能带结构以及优异的光电学特性使之在新一代纳米光电子器件领域中具有广泛的应用前景。但是受限于当前合成工艺水平的限制，生长的单层 TMDs 中存在大量的缺陷态，这些缺陷态能够诱导载流子的非辐射复合、传输过程中的散射以及金属与半导体之间明显的接触势垒等，严重限制了 TMDs 基光电子器件的性能。因此，对 TMDs 的缺陷和发光性能进行详细的研究是十分必要的。这里以硫化钨为例，我们首先利用激光处理二硫化钨单分子层的表面，实现了单层二硫化钨近三倍的荧光增强。通过拉曼光谱发现：随着激光辐照时间的增长，材料中的含氧键在随之增加，证实了氧原子在激光照射作用下对硫空位进行了等电子的掺杂。随后，为了进一步解析该荧光增强的原因，我们运行变功率光致发光测试，通过分峰拟合获得三个不同的发光峰，分别源

于中性激子、带电激子和束缚激子。我们发现随着随着激光处理时间的增加，WS₂材料中缺陷态的数目逐渐减少，从而降低了体系内载流子浓度，使得三子浓度降低，最终引起了荧光强度的提升。这种激光处理的方法可以简单有效地修复二维二硫化钨缺陷并改善发光性能，为TMDs在未来应用的进程中提供了有价值的理解和帮助。

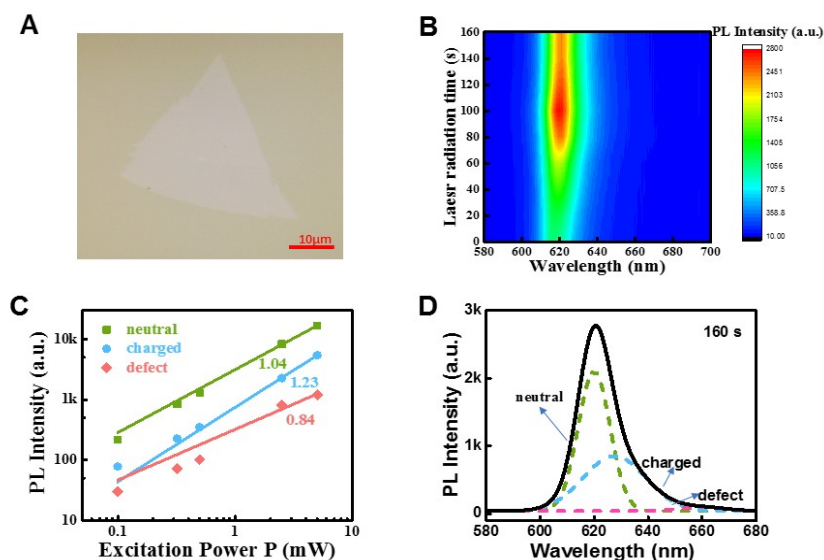


图 1.a 光学图片。b 在室温条件下，WS₂单分子层的 TDPL 谱。c 在室温条件下，激发功率为 0.1 ~ 5mw 的 WS₂单分子层的 PDPL 谱。d 激光辐照 160s 后分峰拟合的 PL 光谱

关键词： 气体掺杂 激光处理 发光调控

参考文献

- 【1】 Li, Y et al., Controlled Gas Molecules Doping of Monolayer MoS₂ via Atomic-Layer-Deposited Al₂O₃ Films, ACS Appl. Mater. Interfaces 2017, 9, 27402–27408

G-P054

专题代号： G

分子束外延生长单层 CrI₃

李培根¹、王聪²、张济海¹、陈沈威¹、郭东辉¹、季威²、钟定永¹

¹ 中山大学物理学院, 广州 510275

² 中国人民大学物理系, 北京 100872

Email: dyzhong@mail.sysu.edu.cn

摘要: 二维铁磁材料三碘化铬 (CrI_3) 近几年来得到了广泛的研究, 被认为是一个理想的研究二维磁性的平台。 CrI_3 具有层内铁磁, 层间反铁磁的磁结构, 制备的磁性隧道结器件可以达到 19000% 的隧穿磁阻, 有望作为自旋电子器件的理想材料。目前单层 CrI_3 的制备方法是通过机械剥离来获得, 但机械剥离有相对产率较低, 薄膜的厚度和大小不可控等缺点。这里, 我们报道了在超高真空下利用分子束外延方法在 Au(111) 和 HOPG 衬底上生长单层 CrI_3 , 并通过扫描隧道显微镜 (STM) 表征其原子结构和局域态密度。碘三聚体被认为是 CrI_3 最上层 (碘原子层) 的基本单元, 每个单元由围绕以铬原子蜂窝晶格的六重对称中心 (铬空位) 的三个碘原子组成。在 Au(111) 上, 单层 CrI_3 具有不同的超结构, 其周期分别为 2.93 nm、2.32 nm 和 1.83 nm。而在 HOPG 上, 单层 CrI_3 未发现超结构。在 423K 温度下退火处理, 部分 CrI_3 发生分解, 形成 CrI_2 。我们的变偏压 STM 图表明费米能附近的 CrI_3 未占据态分布偏向铬空位, 形成碘的三聚体, 而其占据态的分布主要靠近铬的位置, 这与我们的密度泛函理论计算结果一致。

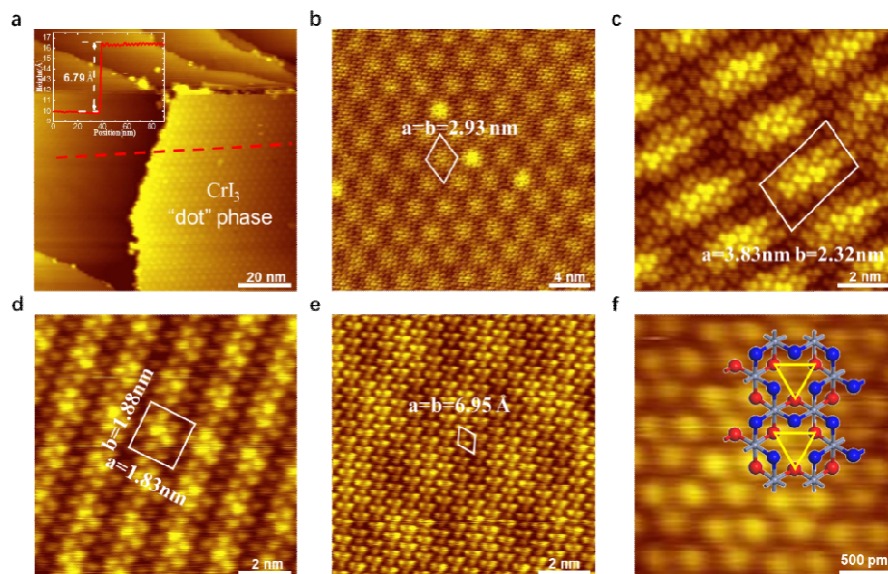


图 1: **a**: 单层 CrI_3 生长在 Au(111) 上, 单层高度为 6.79 Å; **b, c, d**: 三种不同的 CrI_3 超结构在 Au(111) 上; **e, f**: CrI_3 原子分辨 STM 图, 碘的三聚作为基本单元

关键词: 二维磁性材料三碘化铬分子束外延生长

参考文献:

- 【1】 Song T, et al., Giant tunneling magnetoresistance in spin-filter van der Waals heterostructures, *Science*. 2018, 360 (6394), 1214.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (NO.11574403)

G-P055

专题代号: G

硅烯纳米带异质结磁性半导体的理性设计

李鹤鸣、崔彬、刘德胜

山东大学物理学院, 济南 250100

Email: cuibin@sdu.edu.cn liuds@sdu.edu.cn

摘要:

硅烯是一种二维(2D)六角蜂窝状硅同素异形体, 于2010年首次在Ag(111)衬底上合成。硅烯拥有融合传统半导体材料器件的应用潜力, 因此受到了极大的关注。硅基材料中自旋极化电流的产生和传输是自旋电子学中最具吸引力的主题之一。类似于锯齿形石墨烯纳米带, 锯齿形硅烯纳米带也具有两个简并的自旋反平行排列的边界态。为应用于自旋电子学, 科学家提出了许多策略来解除边缘状态的自旋简并及在ZSiNR中实现自旋极化, 例如横向电场, 边缘化学装饰, 和缺陷等等。在这里, 我们提出了一种设计硅基磁性半导体的策略, 该磁性半导体基于与蜂窝状III-V化合物纳米带(即ZSi/AIPNR和ZSi/GaAsNR)与锯齿形硅烯纳米带形成共价键合的纳米带异质结。第一性原理计算发现, 通过调整异质结的边缘状态, 可以实现高自旋过滤效率以及方向相反的自旋极化。进一步的分析表明, 这是由于连接到Si原子上的III(Al, Ga)或V(P, As)原子引起的方向相反的横向电场的结果。重要的是, 我们发现Si-III界面的异质结纳米带更适用于自旋过滤应用。同时还证明了该异质结的自旋极化和自旋过滤效率与III-V化合物纳米带的宽度无关, 因此具备鲁棒性。

关键词: 硅烯异质结, 自旋过滤效应 界面

参考文献

【1】 B. Lalmi, H. Oughaddou, H. Enriquez, A. Kara, S. Vizzini, B. Ealet and B. Aufray, Applied Physics Letters, 2010, 97, 223109.

【2】 B. Feng, Z. Ding, S. Meng, Y. Yao, X. He, P. Cheng, L. Chen and K. Wu, Nano Lett, 2012, 12, 3507-3511.

【3】 P. Vogt, P. De Padova, C. Quaresima, J. Avila, E. Frantzeskakis, M. C. Asensio, A. Resta, B. Ealet and G. Le Lay, Phys Rev Lett, 2012, 108, 155501.

基金项目：国家自然科学基金项目（NO.11574118 and 21473102）

G-P056

专题代号： G

ZnO/MgZnO(MP)核壳纳米线中的电子迁移率

薛忠贤、屈媛、班士良

内蒙古大学 物理科学与技术学院 呼和浩特 010021

Email: quyuan@imu.edu.cn (屈媛)

摘要：ZnO 纳米线由于其具有 III-V 族相类似的宽直接带隙、体表比例大、可控参数多等优点被广泛应用到纳米光电器件中，尤其 ZnO 基纳米线经常被作为场效应晶体管[1]及太阳能电池[2,3]的基元材料。对于三元混晶 $Mg_xZn_{1-x}O$ 晶体，当 Mg 组分 $x < 0.37$ 时，可呈现为纤锌矿结构(WZ)，当 $x > 0.62$ 时，仅可生长为立方岩盐矿结构(RS)，在 $0.62 > x > 0.37$ 的区域，则形成既存在纤锌矿又存在岩盐矿的两相之混相(MP)[4]。

我们基于力平衡方程和能量平衡方程，讨论了 ZnO/MP- $Mg_xZn_{1-x}O$ 核壳纳米线(CSNWs)中的光学声子及其对电子迁移率的影响。我们发现在无论在 ZnO/RS- $Mg_xZn_{1-x}O$ 还是在 ZnO/WZ- $Mg_xZn_{1-x}O$ 中，其中局域模对电子迁移率的影响较大。在 ZnO/RS- $Mg_xZn_{1-x}O$ CSNWs 中只存在界面模(IF)和局域模(CO)声子，并且其总迁移率和其 CO 声子的迁移率相同，都在组分 $x < 0.357$ ，随着组分的增加其迁移率增加，在 $x > 0.357$ 时，随着组分增加其迁移率在减小。而在 ZnO/WZ- $Mg_xZn_{1-x}O$ CSNWs 中，我们发现存在传播模(PR), IF, CO 三种声子。总迁移率在 $x < 0.66$ 时，CO 声子的电子迁移率随着组分的增加在减小，在 $x > 0.66$ 时，反而在增加。通过本文讨论的光学声子行为及对电子迁移率的影响，对于推动本领域的实验和理论发展，指导新材料制备和器件开发有着重要意义。

关键词：核壳纳米线 局域模声子 传播模声子 电子迁移率

参考文献：

【1】 Q. Du, J. Ye, Z. Xu, S. Zhu, K. Tang, S. Gu, and Y. Zheng, *Nanotechnology*, 2018, **29**, 115204 .

【2】 N. O. Plank, H. J. Snaith, C. Ducati, J. S. Bendall, L. Schmidt-Mende, and M. E. Welland, *Nanotechnology*, 2018, **19**, 465603 .

【3】 E. Akbarnejad, F. D. Nayeri, and M. Ghoranneviss, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2018, **51**, 095105.

【4】 I. Takeuchi, W. Yang, K.-S. Chang, etc. , *J. Appl. Phys.*, 2013, **94**, 7336.

基金项目：国家自然科学基金项目（NO. 61764012 and 11304142）

G-P057

专题代号： G

Growth of Monolayer Arsenene on Au(111)

Guwei Liu, Xuefeng Wu, Shuxuan Zhang , Kedong Wang *

Department of Physics, Southern University of Science and Technology,

Shenzhen 518055, China

E-mail: wangkd@sustech.edu.cn

Abstract 2D group-VA materials have been received considerable concerns due to their natural potentials in the photonic and optoelectronic applications. Over the past years, all 2D group-VA materials have been well studied theoretically and, especially, a majority of them have been successfully fabricated in experimentally. The phosphorene as the first one possesses high carries about $1000\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ and a tunable direct band gap, from 0.3eV in the bulk to 2.0eV in the monolayer. However, the instability of phosphorene restricts its application. Antimonene and bismuthene in the same group as alternatives have been deeply investigated. However, the only remnant named arsenene had not been fabricated(1-3).

Here we demonstrate here that monolayer arsenene can be successfully fabricated on Au(111) surface at low temperature. An image with atomic-level resolution through utilizing Scanning

Tunneling Microscope (STM) and its Fast Fourier Transform (FFT) image directly display a lattice constant of 3.85Å. Crystal phase of arsenene was evolved into amorphous phase after the room temperature overnight. Same amorphous phase was produced when arsenic grew at room temperature. When amorphous phase consisted of chain-like mesh is annealed to $\sim 673\text{K}$, new phases emerged. The successful preparation of monolayer arsenene stands for the addition of the last member of the group-VA.

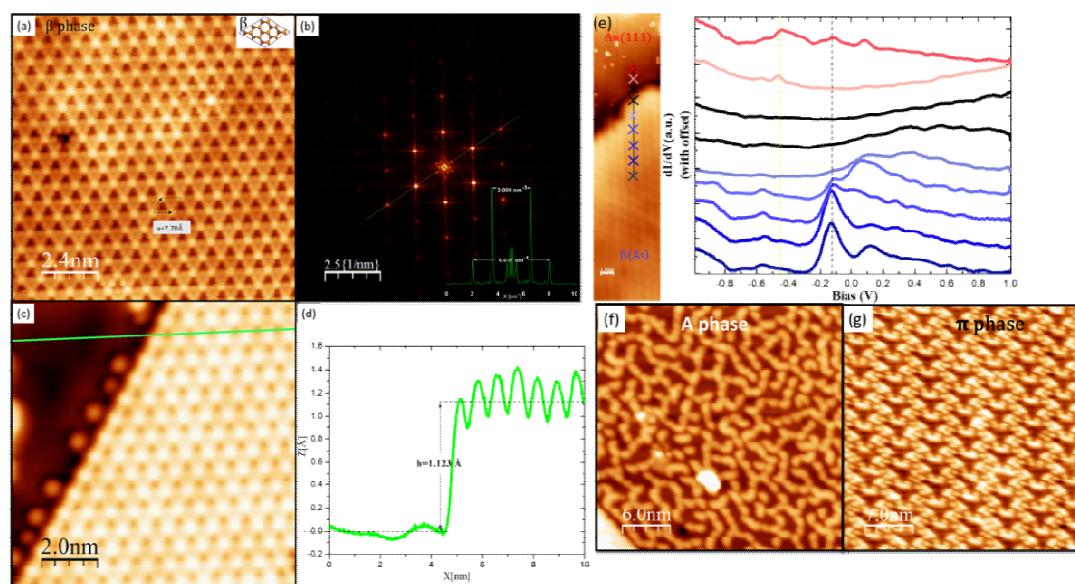


Figure 1. (a) High-resolution STM image of arsenene film (β phase). Inset shows the possible structure. (b) FFT image of (a). (c) Neat edge structure of arsenene and some sparse arsenic particles might implicit growth model of arsenene. (d) A profile across the edge in (c). (e) Density of State of arsenene grown on Au(111), where the edge state at about +0.09V emerges. (f) Amorphous phase of chain-like structure formed at room-temperature. (g) A new ordered phase labeled as π emerged after annealing sample to 673.5K.

KEYWORDS: arsenene, LT-growth, scanning tunneling microscopy

Reference

【1】 S. L. Zhang, Z. Yan, Y. F. Li, Z. F. Chen, H. B. Zeng, Atomically Thin Arsenene and Antimonene: Semimetal-Semiconductor and Indirect-Direct Band-Gap Transitions. *Angew Chem Int Edit* **54**, 3112-3115 (2015).

【2】 S. L. Zhang et al., Recent progress in 2D group-VA semiconductors: from theory

to experiment. Chem Soc Rev **47**, 982-1021 (2018).

【3】 C. Kamal, M. Ezawa, Arsenene: Two-dimensional buckled and puckered honeycomb arsenic systems. Phys Rev B **91**, (2015).

G-P058

专题代号: G

耦合量子点结构中电子的热输运性质

赵志云、黄艳艳、周朋霞

南通大学理学院, 江苏南通 226007 Email: zhzhyun2006@126.com

摘要: 随着科技的发展,人们所使用的设备越来越小型化、微型化,芯片的集成度也越来越高,与此同时,芯片的散热问题却未能得到很好的解决。传统的风冷、水冷技术无法满足微电子器件的散热需求,需要我们寻找更好的方法解决这个问题。近年来,随着微加工技术和纳米技术的快速发展,纳米尺度结构中热电的输运和转换问题成为人们越来越关注的课题。探索纳米尺度结构中的发热规律、研究如何降低和利用纳米器件的发热对于深刻理解电子输运信息、缓解世界能源危机有着非常重要的意义。

在耦合量子点结构中,由于量子相干效应, Fano 效应、库仑相互作用以及外场的作用,自旋 Seebeck 效应和自旋极化得到明显增强,因此合理利用量子点系统中的热电性质将成为回收利用废热非常有效的办法。本文研究了磁场中的两个金属引线侧面耦合量子点分子系统中的电导和热电性质,通过构建量子点分子结构,合理地调节系统的参数,如耦合参数、非对称性的能量等来寻求提高 Seebeck 系数的方法。量子点系统具有实验上易制备、参数易控制、数据易测量等优势,希望本文的研究结果为量子点系统在电子器件、自旋器件以及热电器件等方面的设计提供理论帮助。

关键词: 量子点结构, 热电效应, 热电输运, 自旋极化输运

【1】 K. Uchida, S. Takahashi, K. Harii, J. Ieda, W. Koshibae, K. Ando, S. Maekawa, and E. Saitoh, Observation of the spin Seebeck effect. Nature (London), 2008, 455, 778-781

【2】 K. Uchida, T. Ota, K. Harii, K. Ando, H. Nakayama, and E. Saitoh, Electric detection of the spin-Seebeck

effect in ferromagnetic metals, J. Appl. Phys, 2010, 107, 09A951 .

【3】 Read N, Green D, Paired states of fermions in two dimensions with breaking of parity and time-reversal symmetries and the fractional quantum Hall effect, Phys. Rev. B. 2000, 61, 10267.

【4】 Alicea J, Majorana fermions in a tunable semiconductor device, Phys. Rev. B. 2010, 81, 125318.

【5】 Fu L, Kane C L. Superconducting proximity effect and Majorana fermions at the surface of atological insulator, Phys. Rev. Lett. 2008, 100, 096407.

【6】 Lutchyn R M, Sau J D, Sarma S D. Majorana fermions and a topological phase transition in semiconductor-superconductor heterostructures, Phys. Rev. Lett. 2010, 105, 077001.

【7】 L. Gu, H.-H. Fu, and R. Wu, How to control spin-Seebeck current in a metal-quantum dot-magnetic insulator junction, **Phys. Rev. B**, **94**, **2016**, **115433**.

【8】 B. Dutta, J. T. Peltonen, D. S. Antonenko, M. Meschke, M. A. Skvortsov, B. Kubala, J. König, C. B. Winkelmann, H. Courtois, and J. P. Pekola, Thermal Conductance of a Single-Electron Transistor, Phys. Rev. Lett. 119, 077701 (2017).

【9】 J. P. Ramos-Andrade, F. J. Peña, A. González, O. Ávalos-Ovando, P. A. Orellana, Spin-Seebeck effect and spin polarization in a multiple quantum dot molecule, Phys. Rev. B, 2017, 96, 165413.

【10】 Krzysztof P. Wojcik, Ireneusz Weymann. Thermopower of strongly correlated T-shaped double quantum dots, Phys. Rev. B, 2016, 93, 085428.

基金项目： 国家青年自然科学基金项目（NO.11604163， NO.11604164）

G-P059

专题代号： G

关联氧化物中的电子相摩尔调控

陈欣中^{1‡}、范晓东^{2‡}、李林^{2‡*}、张南²、牛之静¹、郭腾飞³、徐苏恒¹、徐晗^{2,4}、王冬利²、张华洋²、A. S. McLeod⁵、罗震林⁴、陆轻铀³、Andrew J. Millis^{5,6}、D. N. Basov^{5*}、刘梦坤^{1*}、曾长淦^{2*}

¹ 纽约州立大学石溪分校物理和天文学院，石溪 11793，美国

² 中国科学技术大学物理学院、合肥微尺度国家物质科学研究中心, 合肥 230026,
中国

³ 中国科学院强磁场科学中心, 合肥 230031, 中国

⁴ 中国科学技术大学同步辐射国家实验室, 合肥 230026, 中国

⁵ 哥伦比亚大学物理学院, 纽约 10027, 美国

⁶ The Flatiron Institute 计算量子物理中心, 纽约 10010, 美国

摘要: 摩尔调控是一种近年来新兴的研究手段, 应用摩尔调控, 许多凝聚态材料体系中出现了新奇的物理现象。传统的摩尔调控一般在晶格周期尺度, 对于范德瓦尔斯材料来说, 当两种材料的晶格大小有微小的差别时, 由于相邻两层的晶格差异会形成公度周期的摩尔纹, 而这种摩尔纹所引入的周期势场会进而影响材料的性质, 比如最近在魔角石墨烯中出现了令人意想不到的莫特绝缘体态以及超导相。然而到目前为止, 这种摩尔调控还只存在于堆垛的二维材料中。如何将摩尔调控拓展到其他体系一直困扰着研究者们。在这篇文章中, 我们首次在磁阻氧化物 $\text{La}_{0.67}\text{Sr}_{0.33}\text{MnO}_3$ (LSMO) 薄膜中实现了摩尔条纹。利用探针扫描技术, 我们发现在 LaAlO_3 衬底上生长的 LSMO 薄膜会存在两种来源但周期相近的应力周期势场。当两种周期势场以较小的角度交叠在一起时, 其共同作用会产生微米尺度的局域导电性以及磁性的摩尔调制。而由于在 LSMO 体系中, 导电性与应力之间有着非线性的依赖关系, 所以调控结果非常显著。这一发现为在应力外延薄膜中实现可控的电子条纹提供了一种全新的手段。

关键词: 摩尔调控 外延氧化物薄膜 非线性应力效应 近场光学

基金项目: 国家自然科学基金项目 (No. 11434009, 11804326, U1832151, and 11675179) 等

G-P060

专题代号: G

室温下单轴拉伸应变对 n 型单层二硫化钼迁移率的影响:

第一性原理计算

郭菲、刘喆、朱明枫、郑以松

摘要：采用单轴拉伸应变是调节二维材料电子性能的最常用的实验方法之一。室温下，载流子迁移率是半导体器件设计中重要的电子特性。我们将密度泛函理论、密度泛函微扰理论、Wannier 插值和 Boltzmann 输运方程的迭代解联合，从而建立了从第一原理计算层面研究真实材料电输运特性的理论方案。然后，我们运用这一理论方案研究了单轴拉伸应变对 n 型二硫化钼由电子-声子散射决定的室温迁移率的影响。n 型单层二硫化钼在单轴拉伸应变的影响下，室温迁移率表现出明显的各向异性。且单轴应变可以有效调节 n 型二硫化钼沿 zigzag 方向的输运性能。在平行(垂直)于 zigzag 方向施加拉伸应变，室温迁移率会有明显的降低(增强)。例如，当应变强度达到 7% 时，施加平行或垂直于 zigzag 方向的应变时迁移率相差约 2 倍。相反的，当应变方向和应变强度改变时，armchair 方向的迁移率并无明显改变。我们进而分析了应变影响迁移率的机理，其中拉伸应变引起的电子-声子相互作用和能带结构的改变对输运产生重要影响，而应变对声子频率的影响则较小。我们的结果是通过第一性原理计算得到的，没有做任何近似，所以我们的发现为相关实验研究和器件应用提供了可靠而详细的理论信息。

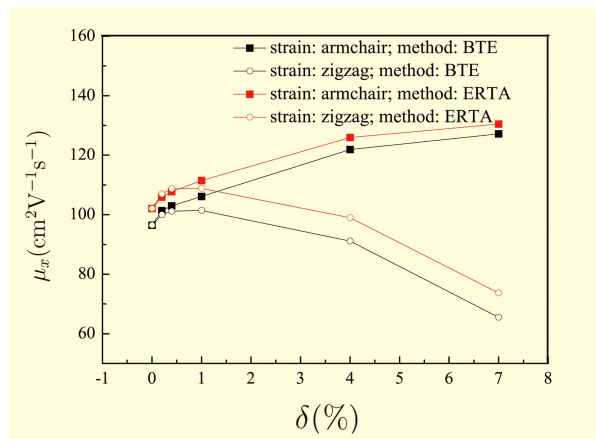


图 1 不同应变下 n 型单层二硫化钼沿 zigzag 方向的室温迁移率

关键词：由电子-声子散射决定的迁移率 密度泛函理论 单轴拉伸应变

参考文献

【1】 F. Guo et al., Effects of uniaxial tensile strain on the electron-phonon scattering limited carrier mobility in a

n-type monolayer MoS₂ at room temperature: first-principles calculations, JPCM, 2019, 31(29), 295502

基金项目：国家自然科学基金项目（NO.11474122 and NO.11774123）等

G-P061

专题代号： G

Synergetic Effect of the Surfactant and Silica Coating on the Enhanced Emission and Stability of Perovskite Quantum Dots for Anticounterfeiting

张飞，史志锋

Key Laboratory of Material Physics of Ministry of Education, and School of Physics, Zhengzhou University, Zhengzhou 450052, China

Email: 1512866648@qq.com

Counterfeiting is a long-standing global problem that poses a threat to the security of individuals and society and has a negative impact on the development of the global economy. Therefore, the development of anticounterfeiting technology is particularly important to prevent serious counterfeiting in the market. In the past few decades, various methods have been proposed to distinguish fake and forged banknotes, such as bar code, laser holograms, and optical watermarks. Recently, the growing demand for optical anticounterfeiting technology has motivated intensive research in newly emerging halide perovskite quantum dots (QDs). However, the poor stability and unsatisfactory fluorescence efficiency of such materials are the main obstacles to the application of reliable anticounterfeiting. In this work, we performed a well-controlled investigation of the effect of the surfactant ($\text{L-}\alpha\text{-phosphatidylcholine}$, LP) and silica encapsulation on the stability and emission of the CsPbBr₃ QDs. Because of the synergetic effect of the surfactant and core/shell configuration, the resulting CsPbBr₃/LP/SiO₂ QD composites demonstrated a higher photoluminescence quantum yield (>90%), a better color purity, and a significantly improved stability in heat, ultraviolet light, water, and ambient oxygen, which provide them the basic conditions as a high-tech security ink for anticounterfeiting. By inkjet

printing technology, we demonstrated that our CsPbBr₃/LP/SiO₂ QD composites can act as a smart concealed ink for information encryption and decryption. More importantly, the anticounterfeiting effect can be efficiently sustained even though the paper with designable patterns was crudely treated by water-soaking, heating/cooling cycling, and continuous ultraviolet light switching (1500 cycles). The above results obtained provide effective strategies to improve emission efficiency and stability of perovskite QDs, thereby enduing them anticounterfeiting application potential.

Key words: perovskite, quantum dots, surfactant, coating, anticounterfeiting

Acknowledgements: The authors acknowledge the financial support from the National Natural Science Foundation of China (nos. 11774318 and 11604302), the Key Scientific Research Projects of Higher Education in Henan Province (no. 18A140007), the Support Program for Scientific and Technological Innovation Talents of Higher Education in Henan Province (no. 19HASTIT017), and the Outstanding Young Talent Research Fund of Zhengzhou University (no. 1521317001).

References

- [1] Zhang, C. Y.; Wang, B.; Li, W. B.; Huang, S. Q.; Kong, L.; Li, Z. C.; Li, L. Conversion of Invisible Metal-Organic Frameworks to Luminescent Perovskite Nanocrystals for Confidential Information Encryption and Decryption. *Nat. Commun.* 2017, 8, 1138.